



ÍNDICE

EDITORIAL	2
NOTICIÁRIO SPQ	3
PRÉMIO NOBEL	9
ENTREVISTA	
Armando J. L. Pombeiro (Prémio Ferreira da Silva 2012)	11
ARTIGO DE OPINIÃO	
Ordenar as Universidades Ibero-Americanas: quantidade, qualidade e dimensão	21
<i>Susana Jarmelo, Tânia F. G. G. Cova, Alberto A. C. C. Pais, J. Sérgio Seixas de Melo, Sebastião J. Formosinho</i>	
ARTIGOS	
A Torre das Ciências	25
<i>Raquel Gonçalves Maia</i>	
A Química na Literatura	29
<i>Maria Helena Santana</i>	
Singularidades Químico-Farmacêuticas da Ficção Queirosiana (2.ª Parte)	33
<i>João Manuel Costa, João Paulo André</i>	
Peculiaridades nos Mecanismos Moleculares de Proteínas em Solução Aquosa: exemplo da importância do equilíbrio ácido-base para aplicações em Biotecnologia	43
<i>Fernando Luís Barroso da Silva</i>	
QUÍMICA E ENSINO	
O Modelo da Esfera Rígida em Folha de Cálculo: geometrias de repulsão mínima da tetra à nonacoordenação	49
<i>Mário Valente</i>	
QUÍMICA PARA OS MAIS NOVOS	55
<i>Marta C. Corvo</i>	
DESTAQUES	59
AGENDA	62
NORMAS DE COLABORAÇÃO E INSTRUÇÕES PARA OS AUTORES	64



Nesta edição do QUÍMICA dá-se destaque à entrevista concedida pelo Professor Armando Pombeiro, distinguido com o Prémio Ferreira da Silva 2012, e ao artigo de opinião sobre os rankings das universidades ibero-americanas.

A propósito dos rankings, recorde-se que o financiamento das universidades e politécnicos, já de si afectado pelos cortes sistématicos dos últimos anos, irá sofrer uma diminuição adicional de várias dezenas de milhões de Euros, de acordo com o OE 2014. Neste cenário, a questão que naturalmente se levanta é se as instituições portuguesas irão ter capacidade de entrar, ou mesmo de se manterem, nos rankings internacionais. Será, certamente, mais um grande desafio...

Outra vertente a que continuamos a dar ênfase é a da relação da Química com outras áreas, de carácter não necessariamente científico. A este respeito recorde-se que a temática da Química está bem presente em diversas obras da literatura universal: de Goethe a Primo Levi, passando por Balzac, Flaubert, Poe, Dickens, Dostoiévski, Zola, Proust, Agatha Christie ou Hoffmann e Djerassi, sem esquecer Shakespeare (em 2014 comemoram-se os 450 anos do seu nascimento!). Sobre a presença da Química na literatura portuguesa, esta edição inclui um interessante artigo da Professora Maria Helena Santana, da Faculdade de Letras da Universidade de Coimbra. Este mesmo artigo dá ainda enquadramento à segunda parte da análise da presença da Química e da Farmácia na obra de Eça de Queirós. Antes destes, surge ainda “A Torre das Ciências”, um olhar sobre as ciências e as suas inter-relações.

Este número contém também dois artigos (um deles de natureza pedagógica) de Química Computacional, precisamente a área em que foi atribuído o Prémio Nobel da Química de 2013. A este propósito, é oportuno recordar o retrato da investigação nacional neste domínio, traçado pelo Professor Fernando M. S. Silva Fernandes num artigo publicado no QUÍMICA 123.

Entretanto, não gostaríamos de nos despedir de 2013 sem fazer uma chamada de atenção para o facto de este ter sido o ano do bicentenário do nascimento de Giuseppe Verdi (e de Richard Wagner). Sobre as relações de Verdi com a Química talvez ainda venhamos a falar aqui um dia mas, para já, adianta-se que o mais humanista dos compositores de ópera, e um dos unificadores da Itália, foi contemporâneo e compatriota de outro unificador - da Itália e da Química: Stanislao Cannizzaro.

E porque o Natal é principalmente das crianças, na secção “Química Para os + Novos” são propostas duas actividades que tudo têm a ver com esta quadra festiva e que inspiraram a capa desta edição.

Votos de Boas Festas.

João Paulo André

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 131, Outubro – Dezembro 2013

Redacção e Administração

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

Editor

João Paulo André

Editores-Adjuntos

Ana Paula Esteves, António Mendonça
Carla Morais, Carlos Baleizão, Paulo Mendes

Comissão Editorial

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

Colaborador desta edição

Helder Gomes

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 Lousã - Portugal
Tel.: 239 990 260 ▪ Fax: 239 990 279
geral@tipografialousanense.pt

Tiragem

1 655 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 do 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 de Outubro-Dezembro 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

SPQ E DEPARTAMENTOS DE QUÍMICA E ENGENHARIA QUÍMICA REUNIDOS NO PORTO



A Sociedade Portuguesa de Química incentivou e apoiou a reunião que envolveu, no Porto a 9 de janeiro de 2013, treze representantes de Departamentos de Química e de Engenharia Química de instituições do Ensino Superior.

Dela resultaram conclusões importantes, tendo sido considerado “incompreensível o facto de o Ministério da Educação promover, no Ensino Secundário, um ensino da Química de carácter quase opcional, diminuído na sua carga letiva sendo conhecida a relevância da área para “a sustentação científica e tecnológica da nossa sociedade”.

Propôs-se assim, entre outras alterações, a inclusão de um conjunto mais limitado de opções para as áreas científico-tecnológicas no 12.º ano, que acrescentariam à Matemática e Português obrigatórios duas opções de entre o conjunto Química, Física, Biologia e Geologia e a realização dos exames nacionais de acesso ao Ensino Superior no final do 12.º ano, além da obrigação da disciplina de Química no 10.º e 11.º anos para quem a tenha no 12.º ano, por motivo de compatibilização. Sugerem-se, também, medidas para motivar os estudantes para a Química a partir do 9.º ano e uma maior componente experimental no 12.º ano, para além de outros aspectos de reformulação curricular.

A direção da SPQ quer manifestar o seu apoio a este documento, que constitui uma contribuição para tentar reverter uma situação que tem prejudicado a formação dos nossos estudantes numa “ciência central para a sustentação científica e tecnológica da nossa sociedade”, e numa área que em Portugal se apresenta em primeiro lugar dos 22 domínios de conhecimento de acordo com os dados do *Essential Science Indicators* e que contribui fortemente para a empregabilidade de recém-licenciados no espaço europeu. O panorama das entradas nos cursos de Química na 1.ª fase do concurso nacional de acesso ao ensino superior público de 2013, mostra como é premente abordar este assunto de forma célere e empenhada.

A direção da SPQ,

Maria José Calhorda
(Presidente)

J. Sérgio Seixas de Melo
(Secretário-Geral)

Posição dos Departamentos de Química e de Engenharia Química sobre a Química no Ensino Secundário

A 9 de janeiro de 2013, reuniram-se, no Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, representantes de treze Departamentos de Química e de Engenharia Química de instituições por-

tuguesas do Ensino Superior, com os objectivos de avaliar o estado do Ensino da Química no Ensino Secundário e de diagnosticar as razões que estão na origem da diminuição das candidaturas a cursos de Química. Esta reunião teve o apoio da Sociedade Portuguesa de Química.

A Química é uma ciência central para a sustentação científica e tecnológica da nossa sociedade, e de grande importância para o desenvolvimento cognitivo dos estudantes. É uma ciência de intervenção interdisciplinar e papel fulcral na procura de soluções para os grandes problemas do nosso tempo, tais como, a poluição ambiental, a escassez de alimentos, a necessidade premente de exploração eficaz de fontes renováveis de energia, ou do desenvolvimento de novas estratégias de combate a diversas doenças. É ponto assente que a Química está na base do desenvolvimento tecnológico e, conseqüentemente, do crescimento do tecido empresarial e desenvolvimento de novos setores industriais. Por todas estas, e outras, razões, a indústria Química tem um papel de relevo no Espaço Económico Europeu, constituindo um mercado de empregabilidade importante para os recém-licenciados.

Tudo isto torna incompreensível o facto de o Ministério da Educação promover, no Ensino Secundário, um ensino da Química de carácter quase opcional, diminuído na sua carga letiva. Manter esta posição será contribuir para o enfraquecimento da formação científica dos nossos estudantes e para um menor desenvolvimento científico do nosso país. Registamos com grande apreensão a forma como o Ministério da Educação tem vindo a tratar o ensino da Química – o atual regime de acesso ao ensino superior, a inadequação dos programas e respetivos conteúdos, a inconveniente organização curricular e as frágeis, ou mesmo ausentes, condições para o ensino prático laboratorial são alguns dos pontos fracos identificados.

Em concreto, abaixo expõem-se, em três pontos, as principais preocupações/sugestões emergentes da dita reunião.

1 - No que diz respeito à deficiente formação experimental dos estudantes, **consideramos altamente recomendável uma reformulação do programa de ensino da Química ao nível do 12.º ano**, na medida em que:

- a) os conceitos mais importantes e estruturantes em Química são abordados nos 10 e 11.º anos;
- b) os estudantes consideram a Química uma das mais difíceis disciplinas do 12.º ano, o que os leva na maior parte das vezes a preferir outras disciplinas menos relevantes para a sua formação;
- c) os estudantes ressentem-se da falta do estímulo que um ensino prático/laboratorial e uma abordagem mais tecnológica da Química trariam.

Por estas razões, **recomendamos vivamente a redução do programa teórico de Química no 12.º ano**, o que poderia ser conseguido tanto por manutenção das três unidades principais do programa vigente, com considerável encur-

tamento de alguns desenvolvimentos menos relevantes no ensino/aprendizagem da Química, quanto por redução do programa apenas às duas primeiras unidades principais, que são aquelas onde se abordam os conceitos mais estruturantes. Seria, assim, possível **introduzir uma componente mais forte de ensino experimental, promovendo a consolidação de conceitos teóricos adquiridos no percurso de formação, mas através de uma abordagem mais tecnológica da Química**. Tal contribuiria não só para uma maior motivação dos estudantes, como também para um desagrevamento da imagem de “inacessibilidade” associada à Química. É importante que os alunos do 12.º ano, na iminência de ingressar no Ensino Superior, reconheçam a Química como ciência experimental e pilar do desenvolvimento tecnológico.

2 - São, também, **vivamente recomendadas modificações ao nível da organização curricular**, nomeadamente:

- a) **reformulação do plano curricular do 12.º ano, com a inclusão de um conjunto mais limitado de opções, constituído pelas disciplinas “Química, Física, Biologia e Geologia”, do qual os alunos das áreas científico-tecnológicas teriam de escolher 2 opções, para além de terem de frequentar a Matemática e o Português (obrigatórias)**; tal contribuiria para o aumento do número de alunos a frequentar a Química de 12.º ano e para uma formação mais sólida nesta disciplina, importante para a prossecução dos seus estudos superiores com sucesso nos cursos científico-tecnológicos, em especial nos afins à Química. Como é sabido, algumas escolas têm poucos estudantes candidatos a frequentar Química no 12.º ano, e existem diretrizes para que não se constituam turmas com menos de 20 alunos candidatos, o que amplifica o fenómeno de esvaziamento desta disciplina no 12.º ano. Seria conveniente permitir que o número de alunos por turma nas disciplinas experimentais, como é o caso da Química, possa ser inferior a 20 por forma a que mais alunos tenham acesso às disciplinas experimentais em escolas com menos alunos.
- b) **transferência dos exames nacionais de acesso ao ensino superior, das disciplinas científico-tecnológicas, do final do 11.º ano para o final do 12.º ano**; as opções dos estudantes do 12.º ano são principalmente ditadas pelo grau de dificuldade esperado para os exames respetivos, o que agrava o problema do abandono da Química; na generalidade dos países europeus é prática comum realizar os exames de avaliação no final do ano imediatamente anterior ao ingresso no Ensino Superior, o que contribui para dar aos estudantes uma formação mais coerente ao longo dos três anos do Ensino Secundário.

3 - **A revisão dos programas curriculares de Química também se revela essencial**, propondo-se:

- a) **recentrar e aprofundar os programas curriculares de 10/11.º ano nos seus conceitos mais estruturantes, removendo a dispersão e preenchendo as**

lacunas criadas pela abordagem de pendor mais contextualizante atualmente existente; a grande amplitude dos programas curriculares de Química para os 10.º e 11.º anos prejudica a qualidade no ensino/aprendizagem das matérias estruturantes, crendo-se preferível transferir uma abordagem de pendor contextualizante para o 12.º ano, indo de encontro ao atrás referido no ponto 1;

- b) **equilibrar a extensão dos programas vigentes para 10.º versus 11.º ano**; o programa do 11.º ano é muito mais extenso que o do 10.º ano, o que reflete alguma falta de coordenação entre estes dois anos; tal é agravado pelo facto de as metas não estarem bem definidas, sendo difícil para o docente ajuizar com que grau de profundidade/dificuldade deve abordar os conteúdos dos referidos programas. Tal reflete-se no facto dos exames nacionais de Física-Química estarem frequentemente desarticulados com o grau de dificuldade/profundidade dos programas lecionados, daí resultando resultados francamente desmotivadores, em que os ditos exames surgem como os de média mais baixa (por vezes negativa) dos exames nacionais;
- c) Reformular os programas do 8.º e 9.º anos de modo a que a Química e a sua importância surja de uma forma mais evidente na formação destes jovens estudantes de modo a cativá-los para esta ciência experimental.

Esperamos que o Ministério da Educação tome nota desta situação e proceda a alterações que levem o discurso da apologia de uma formação sólida, coerente e exigente, a ficar em sintonia com a prática.

É certo que muitos são os fatores que têm contribuído para redução do número de candidatos para os ciclos de estudo em Química no Ensino Superior. Para além da deficiente formação e problemas estruturais a nível do Ensino Secundário, já apontados, o leque de opções de ciclos de estudos no Ensino Superior em áreas afins, sobretudo de pendor mais biológico e que competem com a Química, tem crescido substancialmente nos últimos anos nas Universidades Portuguesas. Por outro lado, existe uma imagem pouco favorável e mesmo depreciativa da Química por parte da sociedade, que não está suficientemente esclarecida, e que se pode refletir negativamente na escolhas dos estudantes pré-universitários. Nomeadamente, é erroneamente considerado que a Química é a causa de muitos problemas ambientais, ou de saúde, quando na realidade é parte obrigatória da solução. Também existe a falsa noção de que a formação em Química está associada a um baixo índice de empregabilidade. Apesar destes problemas ultrapassarem as nossas fronteiras, existem já fortes indícios de mudança na Europa, devidos à importância que esta ciência ocupa no tecido empresarial europeu, cuja reindustrialização está na ordem do dia, e pelos indicadores de empregabilidade serem bastantes favoráveis, quando em comparação com outras áreas científico-tecnológicas. Apesar de acharmos que a mudança deste paradigma passa por uma aposta na divulgação dos aspectos positivos e da importância da Química, como

aliás tem sido feito por algumas Universidades, pela SPQ e por várias entidades privadas, numa tentativa de aproximação da Química à Sociedade, o sucesso desta missão terá de passar por uma ação concertada de todas as instituições envolvidas direta ou indiretamente com a Química, depois de sanados todos os problemas aqui diagnosticados no que concerne o paradigma ensino/aprendizagem ao nível do Ensino Secundário.

Queremos motivar e mostrar aos jovens o fascínio, a importância, a utilidade, o presente e o futuro da Química. Continuaremos e promoveremos o nosso trabalho, faremos a nossa parte. Os nossos estudantes e o nosso país merecem-no!

Porto, 9 de janeiro de 2013

REUNIÃO DA ASSEMBLEIA GERAL DA *EuCheMS*

A reunião geral da *EuCheMS* teve lugar em Budapeste, nos dias 23 e 24 de outubro. O atual Presidente – Ulrich Schubert, da Universidade Técnica de Viena, Áustria, fez um resumo das atividades desenvolvidas e da abrangência desta associação, que tem atualmente 42 sociedades associadas, de 31 países, e representa cerca de 150.000 membros, dos quais cerca de 31.000 são estudantes. A sede está agora em Bruxelas, com instalações que poderão ser usadas pelas sociedades associadas em atividades relacionadas com a *EuCheMS*.

A assembleia foi informada que o colega Maurizio Prato, da Universidade de Trieste, Itália, foi o escolhido para receber o prémio “*EuCheMS lecture*” e irá, portanto, proferir uma das conferências plenárias no *5th EuCheMS Chemistry Congress* que se realizará em Istambul de 31 de agosto a 4 de setembro de 2014.

Da ordem de trabalhos constou também a eleição do próximo presidente da *EuCheMS* e dos novos membros para o conselho executivo. Para presidente foi eleito por unanimidade David Cole-Hamilton, que é atualmente professor na Universidade de St. Andrews, Escócia, e que se aposentará no próximo ano, o que lhe permitirá ter mais tempo disponível para se dedicar às atividades da *EuCheMS*. O novo presidente entrará em funções no início de 2015. Foram eleitos para o conselho executivo da *EuCheMS* Bogusław Buszewski, da Sociedade Polaca de Química, Michael Dröscher, da Sociedade Alemã Bunsen de Química Física, Pilar Goya, da Real Sociedade Espanhola de Química, Ivanka Popović, da Sociedade Sérvia de Química, Livia Simon Sarkadi, da Sociedade Hungara de Química e Saskia van der Vies, da Real Sociedade Holandesa de Química.

Outro dos pontos da ordem de trabalhos foi a alteração da constituição da *EuCheMS*, nomeadamente na sua forma de organização. Os três primeiros artigos sobre a definição desta associação não foram alterados, não só por não se considerar necessário, mas também para evitar entrar em processos burocráticos complicados segundo as leis

Belgas. Os artigos seguintes que constituem os estatutos da *EuCheMS* foram ligeiramente retocados. Uma das principais alterações está relacionada com a definição dos membros associados, que passam a denominar-se membros ordinários e membros apoiantes. Esta última definição permitirá que diferentes tipos de organizações possam vir a tornar-se membros da *EuCheMS*. Haverá também os agora denominados membros observadores e que no passado eram identificados como membros associados. Outra das grandes alterações está relacionada com as votações nas assembleias gerais. Até agora a maioria das votações exigia dupla maioria, isto é maioria de votos das sociedades associadas e do total de membros representados pelas sociedades votantes. A proposta aprovada considera uma maioria simples das sociedades votantes, às quais são atribuídos diferentes números de votos de acordo com as cotas pagas à *EuCheMS*. Neste tipo de votação, as sociedades pequenas, como a SPQ, terão menos influência nos processos de decisão. Contudo, o número de votos atribuído a cada uma das sociedades foi calculado de forma a que as duas maiores sociedades juntas (*German Chemical Society* e *Royal Society of Chemistry*) não conseguem ter mais votos que as outras todas juntas.

Foi aprovada a adesão de um novo membro, a Sociedade Estoniana de Química, e a dissolução da divisão de Electroquímica da *EuCheMS*, por falta de atividade e de interesse dos seus membros. Os membros desta divisão serão integrados nas divisões de Química-Física or de Química do Estado Sólido.

Fez também parte da assembleia geral a apresentação das contas da *EuCheMS* relativas ao ano 2012. As contas foram auditadas pelos representantes de duas das sociedades associadas (C. Radu da Sociedade Romena de Química e R. Dommissie da Real Sociedade Flamenga de Química), os quais foram já nomeados auditores para as contas de 2013. Houve um saldo positivo de cerca de 83,5 keuro, mas metade deste foi resultante do lucro do congresso da *EuCheMS* de Nuremberg (2011). Tendo em consideração este saldo positivo, as cotas das sociedades, no seguimento do que aconteceu já nos últimos três anos, não serão aumentadas. Porém, como em 2014 se irá aplicar às cotas a pagar à *EuCheMS* um fator multiplicativo, correspondente ao real valor do euro em cada país, a cota da SPQ irá diminuir, embora o valor total de cotas da *EuCheMS* venha amanter-se constante.

A assembleia geral da *EuCheMS* do próximo ano irá ter lugar em Torun, Polónia, em outubro de 2014.

Artur Silva
(artur.silva@ua.pt)

JUBILAÇÃO DO PROFESSOR SEBASTIÃO FORMOSINHO

A cerimónia de jubilação do Professor Sebastião Formosinho teve lugar no dia 20 de Setembro de 2013 no Departamento de Química da Universidade de Coimbra, onde



era Professor Catedrático. Tive ocasião de o encontrar em várias ocasiões da minha vida académica, sendo uma das primeiras lembranças associada ao *NATO Advanced Study Institute Theoretical and Computational Models in Organic Chemistry* que organizou no Vimeiro em Agosto/Setembro de 1990. Convidou-me para uma lição e durante as duas semanas que durou o curso tivemos oportunidade de trocar impressões sobre muitos assuntos, situação que se repetiu mais tarde noutras ocasiões. Em 1993, fez parte do júri das minhas provas de Agregação no Instituto Superior Técnico.

Sebastião Formosinho licenciou-se na Universidade de Coimbra em 1964 e em 1971 terminou o doutoramento na *Royal Institution, University College*, Londres, Reino Unido. Obteve a agregação em 1974 na Universidade de Coimbra, para onde entrou como Professor Auxiliar em 1971. A sua área de especialização é a Fotoquímica. Para além de uma extensa carreira como professor e investigador (172 artigos científicos, 4 artigos de revisão, cerca de 2500 citações científicas, 2 patentes mundiais, <http://formosinho.transnatural.com/index.php/pt/curriculum>), contribuiu activamente para o desenvolvimento da Sociedade Portuguesa de Química, tendo sido Presidente entre 1992 e 1997 e Presidente da Mesa da Assembleia Geral entre 2001 e 2006. Recebeu em 1984 o Prémio Ferreira da Silva, concedido a um químico português que, pela obra científica produzida em Portugal, tenha contribuído significativamente para o avanço da Química, em qualquer das suas áreas.

É membro efectivo da Academia das Ciências de Lisboa (2006) e recebeu vários prémios científicos (Artur Malheiros, Academia das Ciências de Lisboa, 1972; Ciência, Fundação Gulbenkian, 1994; Estímulo à Excelência, FCT, 2004/2005)

Os seus interesses têm abrangido muitas outras áreas, para além da Química, nomeadamente a epistemologia das ciências, relações entre ciência e religião, controvérsias científicas, e levaram a uma intervenção na sociedade bem visível no caso da co-incineração de resíduos. Esta vertente da sua actividade foi também premiada (Prémio Aboim Sande Lemos da Faculdade de Teologia da Universidade Católica Portuguesa, 1998; Prémio INVENTA 2011).

De entre a sua extensa obra pedagógica é de realçar o livro *Chemical Kinetics. From Molecular Structure to Chemical Reactivity*, Elsevier, 2007, em colaboração com dois professores da Universidade de Coimbra.

Maria José Calhorda
(mjc@fc.ul.pt)

LUÍS BELCHIOR DOS SANTOS DISTINGUIDO COM O PRÉMIO JAMES CHRISTENSEN MEMORIAL AWARD

Luís Manuel das Neves Belchior Faia dos Santos, docente e investigador do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, foi distinguido este ano com o prémio *James Christensen Memorial Award*, um dos mais importantes prémios internacionais na área da Química. O prémio, criado em 1988 em honra do professor James J. Christensen da Brigham Young University, é atribuído anualmente pela *Board of Officers and Directors of the Calorimetry Conference USA* a um cientista que tenha feito contribuições extraordinárias para o desenvolvimento/concepção de calorímetros e do seu uso. A atribuição foi feita durante a *Calorimetry Conference U.S.A. (Calcon 2013)* e fez do docente e investigador nacional o 23.º cientista, a nível mundial, a receber o prémio.



Luís Belchior dos Santos é actualmente Professor Associado no Departamento de Química e Bioquímica da FCUP, director de Curso da Licenciatura em Química e membro integrado do Centro de Investigação em Química da Universidade do Porto. A sua actividade de investigação centra-se no estudo termofísico e termoquímico de compostos poliaromáticos, materiais semicondutores orgânicos e líquidos iónicos. Paralelamente dedicou-se ao desenvolvimento de metodologias e instrumentação nas áreas da calorimetria, termofísica e metrologia de temperatura e pressão, trabalho que lhe valeu agora o prémio com que foi distinguido.

Ao galardoadado aqui fica o reconhecimento da SPQ e do QUÍMICA.

MEDALHAS NA XVIII OLIMPÍADA IBERO-AMERICANA DE QUÍMICA

Os quatro representantes de Portugal na XVIII Olimpíada Ibero-Americana de Química, que decorreu, de 12 a 19 de Outubro de 2013, na cidade de La Paz, Bolívia, foram mais

uma vez um orgulho para o País. Foram seleccionados pelos restantes participantes para prémios simbólicos, que atestam a usual camaradagem dos estudantes portugueses. Além disso, dois dos estudantes tiveram medalha, uma de bronze e uma de ouro. Esta foi a segunda vez que um estudante português teve uma medalha de ouro. No aeroporto de Francisco Sá Carneiro, Porto, a equipa foi saudada com palmas entusiásticas dos familiares e amigos. É cada vez mais importante mostrar que o esforço intelectual também vale a pena.

Este ano, os medalhados foram João Luís Sousa Janela, com a medalha de ouro, que estudou na Escola Secundária Infanta D. Maria em Coimbra, e, com medalha de bronze, a Maria Carolina Amoedo Gonçalves, que estudou na mesma escola. A Maria Francisca Branco Cardoso Portilha Cunha, que estuda no Colégio Luso-Francês, Porto e o Álvaro Miguel Figueira Mendes Samagaio, que estudou no Colégio Cedros e estuda atualmente na Escola Secundária de Almeida Garrett, Gaia, não receberam medalha. No entanto, é de referir que são estudantes mais novos que terão a possibilidade de participar novamente no próximo ano. Basta para tal demonstrarem ter mérito durante a próxima preparação, que está a cargo de docentes, de várias áreas, do Departamento de Química da Universidade de Aveiro. E é sempre com agrado que recebemos o reconhecimento dos próprios estudantes:

“Foi um ano de experiências muito positivas, onde aprendi muito, fiz também alguns sacrifícios, mas onde tudo foi recompensado de uma maneira sublime na espectacular viagem a Moscovo. Por terem sido vocês, em Aveiro, quem me proporcionou tais momentos, devo-lhes um agradecimento”. João Souto



A equipa portuguesa à 18.ª Olimpíada Ibero-Americana de Química em La Paz, Bolívia. Da esquerda para a direita, Álvaro Samagaio, Francisca Cunha, Carolina Amoedo (medalha de bronze) e João Janela (medalha de ouro)

Contudo, nunca será demais reconhecer o esforço e dedicação individual de cada estudante, pois o mérito é essencialmente deles.

Mais do que as medalhas que ganham é o ar feliz com que participam nas diferentes etapas, que nos incentiva a todos a continuar.

Clara Magalhães e Diana Pinto
(mclara@ua.pt)

PRÉMIO PYCA – GRADIVA 2014



O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) e a editora Gradiva irão atribuir o *Portuguese Young Chemists Award 2014 (PYCA-Gradiva 2014)*. Este prémio, agora na sua terceira edição, visa promover a excelência da Química desenvolvida por jovens investigadores, com especial enfoque para o impacto na sociedade.

O prémio destina-se a recém-doutorados (doutoramento concluído em 2012 ou 2013) com idade até 35 anos, premiando o trabalho desenvolvido durante o doutoramento. Esse trabalho deve ser colocado num contexto de divulgação científica de forma a demonstrar a capacidade do jovem investigador para comunicar a relevância do seu trabalho à sociedade em geral.

O vencedor terá a possibilidade de publicar o seu artigo de divulgação científica neste Boletim e apresentar uma comunicação oral no 4th *Portuguese Young Chemists Meeting (4PYCheM)* que decorrerá de 29 de Abril a 1 de Maio de 2014 em Coimbra.

O prazo de candidatura ao prémio estará aberto entre 1 de Dezembro de 2013 e 15 de Fevereiro de 2014.

Todas as informações relativas ao prémio, incluindo o regulamento, estão disponíveis em www.spq.pt/gqj.

CHEMRUS – QUÍMICA ONLINE



O GQJ lança este ano a terceira edição do concurso ChemRus – Química Online, direccionado a alunos até ao 12.º ano.

A participação neste concurso consiste na elaboração de um vídeo, acompanhado de uma ficha experimental, baseado na execução prática de uma experiência química.

O melhor vídeo será distinguido após avaliação, por um júri a divulgar, tendo em conta a relevância e originalidade da experiência executada do ponto de vista científico e pedagógico, a correcção científica, a qualidade e originalidade do vídeo produzido e o detalhe da informação veiculada pelo vídeo e ficha experimental.

O GQJ gostaria de convidar os professores de Química a participar activamente no *ChemRus*, incentivando os seus

alunos a concorrer e orientando a componente laboratorial desta actividade.

O prazo para candidaturas decorre entre 1 de Dezembro de 2013 e 31 de Março de 2014. Todas as informações neces-

sárias para concorrer, incluindo o regulamento do concurso, estão disponíveis em www.spq.pt/gqj.

Inês M. Valente, Luís M. Gonçalves e Marisa Rocha
Direcção do Grupo de Químicos Jovens
(gqj@spq.pt)

ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

RAIOS X “RESSUSCITAM” ÁRIA DE ÓPERA COM MAIS DE DUZENTOS ANOS

A ópera *Médée* de Luigi Cherubini, baseada na tragédia clássica de Eurípides, estreou em Paris em 1797 perante um público que não se deixou entusiasmar muito, por a achar demasiado longa. Cherubini, para encurtar a ópera, fez então desaparecer da partitura, sob uma espessa camada de algo semelhante a graxa de sapatos, a ária “Du trouble affreux qui me devore”. A versão italiana da ópera (*Medea*), embora truncada, seria a que posteriormente viria a alcançar a fama, tendo tido em Maria Callas um dos expoentes máximos da sua interpretação no século XX.



Secções da partitura da ópera *Medée* (1797) de Cherubini cobertas por espessas manchas pretas



A fluorescência de raios X dos átomos de zinco e de ferro da partitura permitiu a “revelação” da ária que se julgava para sempre perdida

A dita ária teria continuado perdida se um grupo de investigadores do *SLAC National Accelerator Laboratory* da Universidade de Stanford (EUA) e da Universidade de Manchester (Reino Unido) não a tivesse recentemente recuperado. Para esse efeito recorreram à fluorescência de raios X, técnica espectroscópica que consiste na emissão de raios X “secundários” por um material previamente excitado com raios X de elevada energia ou raios gama. Estas duas formas de radiação são suficientemente energéticas para retirar ao átomo um ou mais electrões de orbitais interiores. Quando tal acontece, verifica-se que electrões de orbitais mais exteriores tendem a ocupar a lacuna criada, processo que é acompanhado pela emissão de um fóton de energia correspondente à diferença de energia das orbitais envolvidas. Dado que essa diferença de energia é específica para cada elemento, a fluorescência de raios X proveniente de um material funciona como uma “impressão digital” elementar.

No caso presente, a partitura foi irradiada com raios X de sincrotrão (acelerador cíclico de partículas no qual os campos eléctrico e magnético estão cuidadosamente sincronizados com o feixe de partículas) tendo-se observado a fluorescência emitida pelos átomos de ferro existentes na tinta usada por Cherubini e pelos átomos de zinco das linhas da pauta, permitindo assim vislumbrar a composição musical escondida há mais de dois séculos sob a densa mancha preta.

Finalmente a ópera *Médée* pode voltar a ser levada à cena como Cherubini originalmente a concebeu e a “nova” ária já pode ser ouvida, em arranjo para piano, em: http://news.stanford.edu/news/2013/june/lost_music_recording.mp3.

(adaptado de <http://news.stanford.edu/news/2013/june/slac-music-xray-061013.html> e de <http://www.bbc.co.uk/news/entertainment-arts-22910052>)

João Paulo André
(jandre@quimica.uminho.pt)

PRÉMIO NOBEL DA QUÍMICA 2013

Este ano o prémio foi atribuído a Martin Karplus (Universidade de Estrasburgo, França, e Universidade de Harvard, EUA), Michael Levitt (Universidade de Stanford, EUA) e Arieh Warshel (Universidade da Carolina do Sul, EUA). O anúncio foi feito no passado dia 9 de Outubro de 2013 pelo Professor Staffan Normark, Secretário Permanente da Real Academia Sueca das Ciências, e visou premiar o “desenvolvimento de modelos multi-escala para sistemas químicos complexos”.

O uso de computadores para simular sistemas moleculares tem permitido uma cooperação frutuosa entre a teoria e a experiência, desta forma ajudando à resolução e esclarecimento de muitos problemas. Tradicionalmente, os cálculos realizados têm subjacentes os princípios da física clássica ou os princípios da mecânica quântica. Nos métodos baseados na mecânica quântica, os electrões e os núcleos atómicos são as partículas que constituem os modelos. Nos modelos baseados na mecânica clássica são átomos ou grupos de átomos que são descritos. Como os modelos baseados na mecânica clássica lidam com teoria relativamente mais simples, equações clássicas de movimento ou da mecânica estatística clássica em que a energia potencial é calculada a partir de um campo de forças, estes permitem uma modelação computacional mais rápida e o estudo de sistemas de grandes dimensões. Têm contudo a limitação de não permitirem o tratamento de reacções químicas, em que estão envolvidas a quebra e formação de ligações químicas. Estas exigem os princípios da química quântica para poderem ser tratadas mas, dada a elevada exigência em termos de tempo computacional, os cálculos estavam limitados a moléculas ou sistemas moleculares relativamente pequenos, o que excluía, por exemplo, as grandes moléculas biológicas, nomeadamente as proteínas.

Os laureados deste ano foram pioneiros no desenvolvimento de métodos que permitem unir ambas as abordagens simulando uma parte de um sistema complexo usando métodos da química quântica e aliando esta parte a uma envolvente, que é tratada usando os princípios da mecânica clássica, integrando-as de uma forma fisicamente consistente. Usando como exemplo uma área de investigação actual, a simulação da forma como um fármaco se liga à sua proteína-alvo no organismo, o computador executa cálculos quânticos apenas nos átomos da proteína-alvo que interagem directamente com o fármaco, fornecendo a informação máxima nessa localização (e incluindo a possibilidade de se formarem ou quebrarem ligações químicas). O resto da proteína é simulado usando métodos baseados nos princípios da mecânica clássica, muito menos exigentes sob o ponto de vista do custo computacional.

Como se pode ler no comunicado da Real Academia Sueca das Ciências, os trabalhos dos laureados deste ano permitiram aproveitar “o melhor de dois mundos”, com “Newton e a sua maçã a colaborarem com Schrödinger e o seu gato”.

Segundo a Real Academia Sueca das Ciências, “a importância dos métodos desenvolvidos por Martin Karplus, Michael Levitt e Arieh Warshel reside no seu carácter universal. Podem ser usados para estudar todo o tipo de sistemas químicos, das moléculas da vida aos processos químicos industriais.” Um dos sonhos de Levitt é simular a totalidade de um organismo vivo ao nível molecular. E segundo a academia, “só o futuro pode decidir” se as poderosas ferramentas desenvolvidas pelos laureados irão um dia ajudar a concretizar esse sonho.

Os laureados:



Martin Karplus

Cidadão austríaco e norte-americano, nascido em Viena (Austria) em 1930, é Professor na Universidade de Estrasburgo (França) e Universidade de Harvard (EUA).

<http://chemistry.harvard.edu/people/martin-karplus>
<http://www-isis.u-strasbg.fr/biop/start>



Michael Levitt

Cidadão britânico, norte-americano e israelita, nascido em Pretória (África do Sul) em 1947, é Professor na Universidade de Stanford (EUA).

http://med.stanford.edu/profiles/Michael_Levitt



Arieh Warshel

Cidadão norte-americano e israelita, nascido em Kibbutz Sde-Nahum (Israel) em 1940, é Professor na Universidade da Califórnia do Sul (EUA).

<http://chem.usc.edu/faculty/Warshel.html>

Paulo J. Mendes
 (pjgm@uevora.pt)

João Paulo Prates Ramalho
 (jpcar@uevora.pt)

A Sociedade Portuguesa de Química deseja-lhe BOAS FESTAS!

Made in Europe for the World

**ChemPubSoc
Europe**

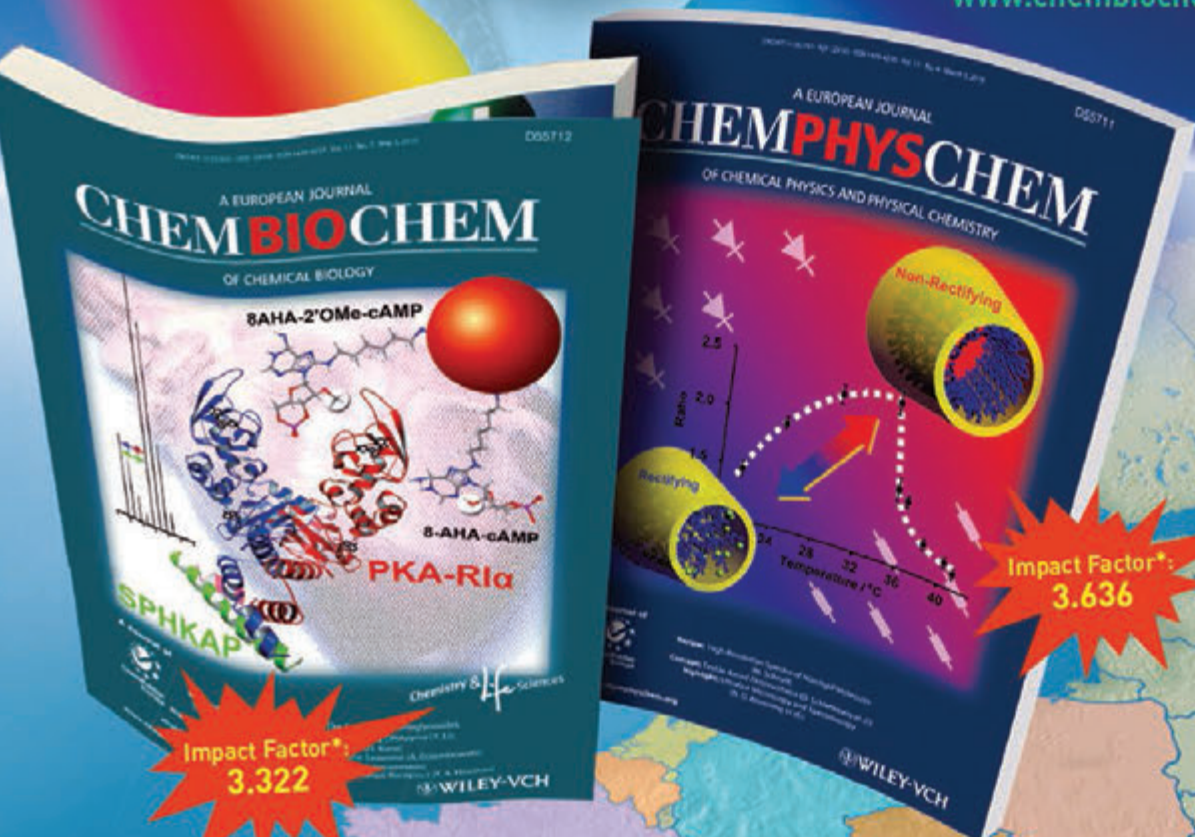
A consortium of 16 European Chemical Societies

2010. 18 issues

ChemPhysChem is a leading journal for chemical physics and physical chemistry. The journal offers an attractive mixture of Communications, Articles & Minireviews
www.chemphyschem.org

2010. 18 Issues.

ChemBioChem is a leading journal for chemical biology and biological chemistry. The journal offers an attractive mixture of Communications, Full Papers, Reviews & Minireviews
www.chembiochem.org



Impact Factor*:
3.322

Impact Factor*:
3.636

10 years of excellent publishing

*2008 Journal Citation Reports® (Thomson Reuters, 2009)

 **WILEY-VCH**

For further information and to subscribe
please send an e-mail to:

cs-journals@wiley.com

(Americas, Europe, Middle East and Africa, Asia Pacific)

service@wiley-vch.de (Germany, Austria, Switzerland)

cs-japan@wiley.com (Japan)

ARMANDO J. L. POMBEIRO

PRÉMIO FERREIRA DA SILVA 2012

ENTREVISTA CONDUZIDA POR
HELDER GOMES E CARLOS BALEIZÃO



O Professor Armando Pombeiro foi galardoado com o Prémio Ferreira da Silva 2012. Este prémio, instituído pela Sociedade Portuguesa de Química em 1981, tem como objectivo o reconhecimento de químicos portugueses que, pela obra científica produzida em Portugal, tenham contribuído significativamente para o avanço da Química em qualquer das suas áreas. Em particular, o Prof. Armando Pombeiro possui um currículo notável nas áreas da Electroquímica e das Químicas de Coordenação, Inorgânica, Bioinorgânica e Organometálica, e da Catálise. Aproveitamos a sua disponibilidade para conhecer o seu percurso académico e científico.

BQ: Parabéns pela obtenção do Prémio Ferreira da Silva, atribuído pela SPQ como reconhecimento da sua carreira científica. Como recebeu esta notícia?

AP: Ao longo da minha vida, incluindo o tempo de estudante, nunca me candidatei, por princípio, a nenhum prémio (fi-lo excepcionalmente uma única vez), dado que não trabalho com esse objectivo. Em relação ao Prémio Ferreira da Silva, tomei conhecimento por mero acidente de que havia uma proposta nesse sentido dirigida à Sociedade Portuguesa de Química, subscrita por um grupo de colegas, a quem agradeço por se lembrarem de mim, sem nada me dizerem (a eventual atribuição do prémio seria para mim uma surpresa...).

Penso que já passei a fase em que os prémios poderiam contribuir para o progresso da minha carreira, mas considero a atribuição deste como o reconhecimento do trabalho do Grupo que coordeno, e assim foi com satisfação que recebi e transmiti esta notícia aos meus colaboradores.

BQ: Concluiu a licenciatura em Engenharia Química no IST em 1971 e em 1976 concluiu o doutoramento na Universidade de Sussex, em Inglaterra. Na altura era já assistente no IST, o que o motivou a realizar o seu doutoramento fora de Portugal?

AP: A minha saída de Portugal com vista ao doutoramento resultou naturalmente da falta de condições, nessa altura, no IST (e em todo o país) adequadas aos estudos que pretendia realizar, no domínio da Fixação de Azoto, o qual me havia sido sugerido pelo Professor Fraústo da Silva, sempre atento aos novos temas e desafios da Química, e que me convidara para docente do IST (Assistente Estagiário) e para integrar o seu Grupo, em 1971. A ele devo a minha integração na docência e investigação nesta Escola,

e entre nós desenvolveram-se profundos laços de amizade ao longo das quatro décadas (42 anos até à actualidade) que se seguiram. Se este convite não tivesse ocorrido, teria regressado à Universidade do Porto, onde estudara até ao ano terminal da Licenciatura, antes de vir para o IST, e em cuja Faculdade de Ciências seria admitido. Sem dúvida que a minha vida e carreira teriam sido muito diferentes.

A ida para Sussex ficou também associada ao meu desejo e curiosidade de aprender o mais possível, e uma unidade de investigação que era uma das mais conceituadas (*Unit of Nitrogen Fixation*), dirigida por um dos cientistas mais proeminentes (Professor Joseph Chatt), a nível mundial, constituiu uma atracção irresistível.

O tema da Fixação de Azoto, de grande relevância (esta reacção química é considerada pela *National Academy of Sciences*, dos EUA, como a segunda mais importante, logo após a fotossíntese), era então também estudado com grande empenho no INEOS (*Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds*), Moscovo, liderado pelo Professor Vol'pin, e também considerei a possibilidade de para aí me deslocar. No entanto, as dificuldades de acesso à (e na) URSS decorrentes da conjuntura política da altura, cedo me levaram a concluir que não seria uma experiência viável.

BQ: De que modo o trabalho que realizou em Inglaterra contribuiu para a definição do seu percurso científico?

AP: Quando cheguei à Unidade de Fixação de Azoto, em Sussex, com uma bolsa atribuída pelo Instituto de Alta Cultura, em 1973, os meus supervisores de doutoramento (Professor J. Chatt e Dr. R.L. Richards) deram-me um projecto que não era integralmente no domínio da Fixação de Azoto. Com efeito, já aí havia um elevado número de investigadores dedicados a esse tema, e entenderam que seria melhor eu dirigir os meus estudos numa direcção um

pouco diferente, embora relacionada: a química de coordenação de isonitrilos (CNR), compostos que, tal como o diazoto (N_2), apresentam uma ligação tripla insaturada entre dois átomos e são também substratos da nitrogenase (nessa altura só era conhecida uma), a enzima fixadora de azoto, sendo igualmente reduzidos enzimaticamente com quebra completa dessa ligação.

Os isonitrilos são muito mais reactivos e versáteis do que o diazoto, e o tema que segui deu-me uma boa experiência em vários domínios das Químicas de Coordenação, Inorgânica e Organometálica, julgo que muito mais alargada do que aquela que adquiriria na área mais restrita da química (então quase inexistente) do N_2 . A comparação aprofundada das duas espécies (isonitrilos vs. diazoto), sob diversas perspectivas, estendeu-se, após o doutoramento e o regresso ao IST (em 1976), a outros compostos de moléculas pequenas insaturadas (de preferência substratos enzimáticos, tais como nitrilos e alcinos), constituindo então os primeiros passos do estabelecimento sistemático, no Centro de Química Estrutural (a que pertencço desde a sua fundação), do tema da “Activação de Moléculas Pequenas” que se tem vindo a expandir largamente e agora é objecto de interesse generalizado entre os que fazem química preparativa e catálise.

Ainda durante o doutoramento, um investigador do Canadá, de visita à Unidade de Fixação de Azoto, mediu os potenciais de oxidação de um par de séries de complexos isonitrílicos que eu preparara, e esses estudos, embora preliminares e efectuados em condições pouco adequadas, contribuíram para despertar o meu interesse pela Electroquímica Molecular, um domínio que introduzi mais tarde no Centro e se revelou como um dos mais interessantes na minha carreira (recordo, com alguma saudade, que o meu primeiro projecto financiado pela JNICT era intitulado “Investigação das Propriedades Químicas e Electroquímicas de Moléculas Pequenas Activadas por Centros Metálicos de Fixação de Azoto”).



Figura 1 – Fachada do Pavilhão Central do IST

Mas durante o doutoramento em Sussex não foi só o trabalho *per se* que contribuiu largamente para a definição do meu percurso científico. A esse juntou-se a vivência humana, igualmente de grande importância. Fiquei com um conhecimento pessoal de grandes cientistas (Sussex era então uma Universidade nova, com uma Química muito forte na *School of Molecular Sciences*, onde ficava o meu laboratório, subsidiada pela Unidade de Fixação de Azoto) e de técnicos exemplares (análise elementar, sopragem de vidro, oficinas mecânicas, ressonância magnética nuclear, difracção de raios-X), com quem estabeleci relações de amizade, e que muito me ajudaram no início da minha carreira após o regresso ao IST. Curiosamente, num dos extremos do laboratório (Lab. 15) onde trabalhei durante a maior parte do doutoramento (1974-76), na *School of Molecular Sciences* (stage III, um edifício a estrear), havia uma meia bancada e uma câmara exaustora atribuídas ao Dr. Harry Kroto que então instalou, numa pequena sala contígua, o seu primeiro espectrómetro de micro-ondas, um marco importante no sentido da sua contribuição para a descoberta do C_{60} e a atribuição do Prémio Nobel.

BQ: Ao voltar a Portugal após o doutoramento, quais as grandes diferenças que encontrou na investigação científica, comparando com as que teve durante o doutoramento em Inglaterra?

AP: As condições de investigação em Portugal e naturalmente no IST continuavam débeis, mas notava-se já uma tendência clara ao seu desenvolvimento. Por exemplo, o Centro ao qual eu pertencia havia mudado de designação (“Centro de Química Estrutural” em substituição de “Centro de Estudos de Energia Nuclear”) e de local, transferindo-se do velho pavilhão de Química para o recém-criado Complexo Interdisciplinar que se tornaria num verdadeiro oásis da investigação na nossa Escola.

No entanto, a saída do Professor Fraústio da Silva (o fundador e mentor deste Centro, e co-fundador, com o Professor Abreu Faro, do Complexo Interdisciplinar) para o Brasil e Inglaterra, embora sempre mantendo laços com o Centro, resultou em dificuldades ao seu natural desenvolvimento, que se reflectiram na sua evolução.

BQ: Quais os acontecimentos que ajudaram de forma fulcral a evolução da investigação científica em Portugal desde a década de 70?

AP: Muito se poderia dizer, mas irei apenas restringir-me a alguns aspectos que reconheço terem marcado a minha carreira.

Até meados da década de 70, o Instituto de Alta Cultura (IAC) foi a instituição nacional de referência no apoio à investigação. Atribuiu, nomeadamente, bolsas de doutoramento no estrangeiro a um número assinalável (para a época) de assistentes universitários (em que eu estava incluído) que, ao regressarem, já doutorados, contribuíram para o estabelecimento da pesquisa científica no nosso país. É de assinalar, já nessa época, também a acção relevante da Junta Nacional para a Investigação Científica e Tecnológica (JNICT) e da Fundação Calouste Gulbenkian.



Figura 2 – Vários Membros do Grupo V (coordenado por A.J.L. Pombeiro) do Centro de Química Estrutural do IST, integrando a Comissão Organizadora Local da XXV *International Conference on Organometallic Chemistry* (XXV ICOMC) (Reitoria da Universidade de Lisboa, Setembro, 2012)

Ao IAC sucedeu (1976) o Instituto Nacional de Investigação Científica (INIC), dirigido à investigação científica (financiamento de projectos, bolsas e unidades), e o Instituto de Cultura Portuguesa (hoje Instituto Camões) com competência no âmbito da língua e da cultura portuguesas.

A extinção do INIC em 1992 constituiu, na minha opinião, um rude golpe pois, com ela, acabou praticamente a carreira de investigação no nosso país. As atribuições do INIC foram então transferidas para a JNICT, com excepção daquela carreira.

Só muito recentemente, volvidas duas décadas irrecuperáveis, com a criação dos contratos de investigadores do programa Ciência, é que se voltou a assistir a um esforço louvável, embora aparentemente sem sustentabilidade, do que poderia vir a ser o reaparecimento daquela carreira. No caso do meu Grupo, este integrou cinco investigadores Ciência estrangeiros (previamente eram bolseiros de pós-doutoramento, dois dos quais doutorados sob a minha orientação) de elevado mérito. Dois deles já abandonaram o país (um para ocupar uma posição na Universidade de Liverpool) e outro ainda cá permanece (com a sua família) mas já sem contrato, apesar do seu currículo científico excepcional; um outro deve conseguir um novo contrato, e apenas um, entre os 5, conseguiu uma posição sustentável, tendo sido recrutado como docente (professor auxiliar, IST). Todos eles pretendiam continuar aqui as suas carreiras (inclusivamente já haviam adquirido a nacionalidade Portuguesa) e neles muito foi investido... a sua perda, bem como a de muitos outros (não só investigadores do Ciência mas também bolseiros de pós-doutoramento e doutorandos de nível excepcional) em situações de algum modo comparáveis, constitui um desperdício financeiro e científico enorme e irrecuperável no nosso magro sistema de I&D.

A extinção do INIC, em 1992, acompanhou a estagnação (diminuição) do investimento em I&D no nosso país. Com efeito, o orçamento público para I&D em relação ao PIB, que mais que duplicara desde a nossa adesão à CEE até 1992, aproximando-se de *ca.* 0,5%, passou a decrescer até 1995 quando foi criado o Ministério da Ciência e Tecnologia, retomando então o seu crescimento.

Várias reestruturações no sistema nacional de C&T ocorreram durante as últimas décadas, nem sempre de efeitos

claramente positivos, mas a transferência (1997) das atribuições da JNICT para três novos serviços na dependência do Ministério da C&T sem dúvida que teve repercussões importantes: Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, financiamento de projectos e unidades nacionais), Instituto para a Cooperação Científica e Tecnológica Internacional (ICCTI, que passou a integrar a Comissão INVOTAN) e Observatório das Ciências e Tecnologias (com funções de observação e análise, de natureza estatística). O ICCTI foi cinco anos depois substituído pelo Gabinete de Relações Internacionais da Ciência e do Ensino Superior (GRICES) que, por sua vez, também já foi extinto...ilustrando uma aparente dinâmica do sistema nacional de C&T com benefícios nem sempre visíveis.

Na promoção das relações internacionais gostaria de deixar uma palavra ao protocolo de intercâmbio, pouco conhecido e já extinto, entre a Academia das Ciências de Lisboa e a *Royal Society*, o qual, juntamente com outros programas de acordos internacionais mais divulgados (*e.g.*, o do “Tratado de Windsor” entre o Conselho de Reitores das Universidades Portuguesas e o *British Council*, e uma diversidade de acções integradas da JNICT e da FCT), contribuiu para o estabelecimento de núcleos de investigação no nosso país. No meu caso, por exemplo, estes programas, juntamente com uma *NATO Research Grant*, permitiram, durante um período considerável após o meu doutoramento, uma colaboração profícua com grupos da Universidade de Sussex onde me doutorara.



Figura 3 – Salão Nobre da Academia das Ciências de Lisboa

Mas com efeitos de maior visibilidade são os vários programas financiadores de projectos da JNICT e da FCT, a partir de fins da década de 80, em geral apoiados por fundos comunitários, tais como os seguintes, em que coordenei vários projectos: Programa Mobilizador da Ciência e Tecnologia (PMCT), CIENCIA, STRIDE, PRAXIS XXI, POCTI, Programa Nacional de Re-equipamento Científico, POCTI, PPCDT, PTDC, e, muito recentemente, o Programa Doutoral da FCT. Estes programas permitiram com sucesso (espera-se que o mesmo suceda com o último, ainda não iniciado) o lançamento de novos projectos ou o reforço de alguns já existentes, através de um financiamento adicional ao básico.

A atribuição de bolsas de investigação da FCT, de vários tipos, com candidaturas abertas a investigadores estrangeiros, tem também constituído uma das vertentes mais significativas para o progresso da ciência em Portugal (os

recursos humanos são uma componente essencial, direi até a mais relevante). Em particular, o meu próprio Grupo de investigação tem sido fortemente apoiado por doutorandos, pós-doutorados e cientistas convidados estrangeiros, provenientes de uma diversidade de países, em que têm predominado antigas repúblicas socialistas soviéticas (Rússia, Bielorrússia, Ucrânia, Azerbaijão), formando um exército vermelho (*red army*) científico que muito tem contribuído para a expansão e desenvolvimento do Grupo. A Polónia, a Itália, a Áustria, a França, a Espanha, a China, o Brasil e a Índia (com uma representatividade crescente), entre outros, são países que também têm estado representados no meu Grupo de investigação, cujo forte carácter multinacional e multi-cultural tem constituído uma mais-valia. A língua oficial não pode ainda deixar de ser a Inglesa, mas um bom número de bolseiros já fala Português.

No entanto, o já comunicado enfraquecimento do programa de atribuições de bolsas pela FCT, sem uma compensação eficaz através do financiamento de projectos (cada vez com maior carácter aleatório), será um duro golpe nos recursos humanos do sistema de I&D nacional.

Em relação aos programas internacionais da UE, no âmbito dos programas Quadro, penso que, de um modo geral, o seu efeito na comunidade científica do nosso país foi limitado, bem aquém do esperado e da quota nacional.

No meu caso, estive envolvido, com diversos grupos de outros países, em duas redes europeias que foram aprovadas, e naturalmente o seu efeito foi positivo no desenvolvimento dos nossos laboratórios. No entanto, integrei algumas outras candidaturas, de mérito inegável e com grupos excelentes, que não foram seleccionadas.

Com efeito, a taxa de sucesso tem sido tão baixa e a carga burocrática tão elevada nos programas da UE, que, na globalidade, o enorme esforço exigido aos candidatos não me parece que seja recompensado pelas vantagens associadas aos reduzidos casos seleccionados.

Estou particularmente preocupado com a situação dos programas nacionais em relação a estas duas características (baixo sucesso e alta burocracia) que estão a importar da UE, associadas a uma terceira, talvez ainda mais terrível e que parece afectar particularmente a Química: a falta de competência na avaliação nesta ciência!

Parece que a Química, essencial a várias outras ciências, de momento eventualmente mais populares, não está a ser tida na devida conta pelas instituições financiadoras e de ensino.

Se esta situação não for urgentemente corrigida, será inevitável a queda acentuada, aliás já iniciada (nomeadamente no meu Centro), no nível científico e na produtividade da investigação em Química no nosso país.

BQ: Toda a sua carreira académica e científica foi realizada no IST, como viu a evolução desta instituição nos últimos 40 anos?

AP: De um modo geral a evolução do IST é bastante positiva, em termos de expansão, diversificação, intensificação

da investigação e do ensino, relações com a sociedade, reconhecimento no exterior, e foi gratificante a oportunidade de participar com colegas, alunos e funcionários em várias das modificações ocorridas.

No entanto, preocupam-me vários aspectos que, embora não sendo específicos do IST e reflectam a realidade nacional, constituem actualmente fortes limitações nesta Escola à sua evolução no sentido pretendido: o envelhecimento dos recursos humanos na docência e investigação, a quase total impossibilidade de rejuvenescimento (em particular na Química), a falta de continuidade de contratos ou bolsas de investigação a investigadores ou bolseiros de elevado mérito, a escassa autonomia financeira (que, com frequência crescente, bloqueia o seu normal funcionamento e congela actividades básicas, na sequência de condicionalismos extremos financeiros, governamentais ou da FCT), o peso excessivo de critérios economicistas, a burocracia galopante e o limitado apoio logístico (com a perda por docentes da maior parte do seu tempo em funções que outras pessoas sem qualquer curso estariam mais habilitadas a realizar), a insuficiência do reconhecimento da investigação de excelência, a deficiência na avaliação de desempenho dos docentes (que é grave no respeitante à vertente de investigação), a limitada sensibilidade às características e necessidades inerentes à Química experimental, etc.

BQ: E como vê a fusão da Universidade Técnica com a Universidade Clássica de Lisboa?

AP: Esta fusão não é original e segue a tendência que se está a verificar noutros países Europeus. Poderá ter efeitos benéficos, nomeadamente na eliminação de repetições (cursos, serviços, etc.) e na promoção de cooperações no ensino e na investigação, mas não deverá deixar-se guiar por pseudo-critérios de redução “troikiana” da despesa que resultariam na queda da qualidade.

BQ: A sua produção científica é assinalável, sendo co-autor de mais de 500 artigos em revistas internacionais com arbitragem científica, tendo sido reconhecido em 2004 pela FCT com o Prémio Estímulo à Ciência. O que representou para si e para a sua carreira a obtenção deste Prémio?

AP: O prémio que refere foi instituído pelo Ministério da Ciência e Ensino Superior aos docentes que tivessem publicado pelo menos 100 artigos de investigação científica, e julgo que foi atribuído automaticamente mediante a respectiva comprovação. No meu caso (e do Professor Fraústo da Silva), a atribuição foi só no ano seguinte, 2005, pois a Direcção do nosso Centro esquecera-se de nós (os membros do Centro com maior produtividade científica) no ano anterior em que o prémio fora criado.

Este prémio foi uma iniciativa feliz da Ministra e julgo que constituiu um incentivo a quem foi atribuído. Foi pena não ter continuado.

Mas já que esta entrevista decorre da atribuição de um prémio e refere este outro, aproveito a oportunidade para destacar um que para mim tem um significado muito particular: o Prémio Científico Universidade Técnica de Lis-

boa (UTL) - Santander Totta 2007 (1.º ano de atribuição, premiando a produtividade científica e o seu impacto, na área geral de Ambiente, Bioquímica, Biotecnologia, Ciências Biológicas, Engenharia Biológica, Engenharia Química, Nanomateriais, Nanotecnologia, Materiais e Química). Trata-se de um prémio da minha Universidade que foi criado por um saudoso colega e amigo, o Professor Ramôa Ribeiro. Convidou-me pessoalmente para que eu me candidatasse e acedi: foi esse o único prémio a que me candidatei na minha vida...

BQ: De todas as suas publicações há alguma que queira destacar em particular?

AP: Para além da tese de doutoramento, gostaria de seleccionar as seguintes publicações, ainda em inícios de carreira, pelo seu significado pessoal e exigentes de um grande envolvimento:

- Os dois capítulos, ilustrativos dos meus interesses científicos nos inícios da minha carreira, que escrevi para o livro “New Trends in the Chemistry of Nitrogen Fixation”, editado pelo Prof. J. Chatt *et al.*, publicado pela *Academic Press* e pela Academia das Ciências de Lisboa, em 1980, e depois traduzido em língua russa. Este livro seguiu-se a um simpósio com o mesmo título organizado pela Academia das Ciências no âmbito da série “Fronteiras do Conhecimento”, inserida nas celebrações dos seus 200 anos. Este simpósio e o livro respectivo resultaram de uma proposta que apresentei ao Presidente/Tesoureiro da Academia, Gen. Luís Maria da Câmara Pina, e que colheu da sua parte a maior receptividade. Foi também o primeiro congresso internacional em cuja organização estive envolvido e contou com a participação dos cientistas mais conceituados, a nível mundial, no domínio da Fixação de Azoto, então um *hot topic* em ciência.

- O livro “Técnicas e Operações Unitárias em Química Laboratorial”, Série Manuais Universitários, Fundação Calouste Gulbenkian, 1983 (seguiram-se mais três edições), que demorei vários anos a escrever e ilustra o meu gosto pelo ensino. Procurei um tratamento sistemático e unificador, ainda não apresentado anteriormente, e também colmatar uma falha no ensino daqueles temas em língua portuguesa. Os próprios esquemas e diagramas, em elevado número, foram desenhados por mim, sempre manualmente e sem qualquer apoio computacional, recorrendo simplesmente a uma pena (caneta) a tinta-da-china, régua, esquadro e escantilhão... Tenho pena que os originais tenham sido perdidos pela editora/imprensa.

- O artigo de revisão “Electrochemistry of Transition Metal Complexes”, que ilustra a minha forte atracção, desde longa data, pela Electroquímica Molecular, publicado (1983) no primeiro número da *Portugaliae Electrochimica Acta*, revista científica fundada na Academia das Ciências de Lisboa, por minha iniciativa (apoiada pelo então Presidente da Academia, Prof. José Pinto Peixoto). Esta revista tornou-se na da Sociedade Portuguesa de Electroquímica (de que fui um dos fundadores), aquando da sua fundação, e julgo que é actualmente a única revista internacional de investigação em Química publicada em Portugal.

Presentemente (volvidas três décadas desde aquelas publicações) está a dar-me muito prazer a edição de um livro sobre “Advances in Organometallic Chemistry and Catalysis (*The Silver/Gold Jubilee ICOMC Celebratory Book*)”, que ilustra o meu gosto na multi- e interdisciplinaridades das ciências, em particular na abrangência da Química de Coordenação e ciências afins, bem como na organização de congressos, e que constitui a celebração de prata (25.ª edição) e de ouro (50.º ano) da série das *International Conferences on Organometallic Chemistry* (fui o *chairman* da última, a 25.ª, que decorreu no ano passado em Lisboa, com mais de 1200 participantes representando 54 países). Contem mais de 50 capítulos, escritos por conceituados cientistas e jovens promissores (incluindo também autores portugueses ou que desenvolvem a sua investigação no nosso país), cobrindo as múltiplas vertentes destas ciências e suas interacções e interfaces com várias outras.



Figura 4 – Logotipo e mote da Academia das Ciências de Lisboa (*Nisi utile est quod facimus stulta est gloria*): “Se o que fazemos não é útil, vã é a glória”

BQ: Fale-nos um pouco dos seus principais interesses de investigação e desenvolvimentos científicos que alcançou.

AP: Os interesses são muito diversificados e dá-me muito gosto saltar os limites convencionais entre ciências ou áreas diferentes, mostrando a possibilidade da sua ligação e cruzamento. Procuro assim fomentar cooperações entre os meus colaboradores com formações distintas e até entre o nosso e outros Grupos, gerando uma fertilização cruzada (*cross-fertilization*) que por vezes é bastante inovadora e profícua. No entanto, tento seguir um fio condutor na investigação e é gratificante reconhecer elos de ligação entre estudos feitos em áreas diferentes e separados por um largo período de tempo. A investigação lembra-me um cacho de cerejas em que se pega numa e esta arrasta consigo outras que, por sua vez, trazem ainda mais...

Este gosto pela interdisciplinaridade é logo reflectido no título do Grupo de investigação que coordeno no Centro (“Química de Coordenação e Electroquímica Molecular, Síntese e Catálise”) e até no interesse pelo varrimento de elementos (com propriedades e aplicações diversificadas) ao longo da Tabela Periódica. Gosto de saltar sobre os “mosaicos” desta Tabela, procurando um conhecimento mais sistemático ao desenvolver e comparar as Químicas de elementos de grupos ou séries periódicas distintos do que se me focasse num número muito reduzido de elementos.

A investigação tem-se desenvolvido nos *domínios* seguintes cujo estudo sistemático, com frequência, foi introduzido no Centro pelo Grupo que coordeno (com excepção das Químicas Bioinorgânica, Biológica e Teórica):

a) *Activação*, por centros de metais de transição, de *moléculas pequenas* (em particular de significado biológico, industrial ou ambiental, tais como alcanos, diazoto, isonitrilos nitrilos, cianamidas, alcinos, fosfaalcinos, dióxido e monóxido de carbono, óxido nítrico, oximas, azida ou di-hidrogénio) e sua aplicação em *síntese e catálise*, nomeadamente com vista ao estabelecimento de sistemas miméticos de processos biológicos (*e.g.*, catalisados por peroxidases, *p*-metanomonooxigenase, citocromo P-450, galactose-oxidase, nitrilo-hidratases e nitrogenases), de alternativas a processos industriais e de novos tipos de activação molecular de interesse em química fina (incluindo a síntese de compostos bioactivos).

Neste domínio geral, podem referir-se os seguintes temas, procurando-se o estabelecimento de *sistemas activos em condições suaves, ambientalmente toleráveis e sustentáveis*: *Funcionalização de alcanos* (com vista à sua conversão, num só “passo”, em compostos de valor acrescentado, tais como álcoois, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres e organo-halogenetos); *Oxidação catalítica aeróbica de álcoois a aldeídos e cetonas*; *Oxidação catalítica de cetonas* (reações de tipo Baeyer-Villiger); *Acoplamento catalítico C-C (carbono-carbono)*, de tipo Suzuki-Miyaura, Heck, Sonogashira, Henry ou nitroaldol, etc.; *Síntese mediada por metais* de compostos organoazotados (*e.g.*, oxadiazolinas, oxadiazoles, carboxamidas, acetilamidas, imidoilamidinas, iminoisindolinonas, ftalimidias, ftalocianinas, ciano-olefinas ou tetrazoles); *Estruturas metálicas polinucleares, supramoleculares e poliméricas*, sintetizadas por auto-agregação (*self-assembly*) e suas aplicações catalíticas; *Química (de coordenação/organometálica) e catálise em meio aquoso*, recorrendo a novos catalisadores hidro-solúveis; *Química bioinorgânica e biológica*, focando sistemas catalíticos biomiméticos, síntese e avaliação da toxicidade de novos complexos metálicos com actividade anti-cancerígena, e identificação de alvos biológicos nas células.

b) *Electroquímica Molecular* de compostos de coordenação e orgânicos, designadamente com aplicações em electrossíntese, electrocatálise e em estudos mecanísticos, bem como no estabelecimento de relações potencial-estrutura e na indução de reactividade química por transferência electrónica.

c) *Mecanismos de reacções rápidas de protonação de complexos e electroquímicas*.

d) Aplicação de *métodos teóricos* à interpretação estrutural e reaccional, e ao estabelecimento de mecanismos de reacções de compostos de coordenação.

Para o efeito, o Grupo que coordeno tem vindo a estabelecer no Centro diversas *técnicas* (para as quais *adquiriu ou construiu o respectivo equipamento*) e *metodologias*, nomeadamente: (i) de *catálise* em condições *não-convencionais*, tais como, com o recurso a um metal representativo em substituição de um de transição, sem qualquer metal

(*metal free*), sem solvente, assistida por micro-ondas, ou em fluido supercrítico; (ii) de *catálise a alta pressão*; (iii) de *electroquímica molecular convencional* (*e.g.*, electrossíntese e electrocatálise); (iv) de *electroquímica molecular não-convencional* (construção e uso de *ultramicroelectrodos* e sua aplicação em voltametria rápida, bem como desenvolvimento e uso de métodos de *simulação digital em voltametria cíclica* e sua aplicação ao estudo dos mecanismos de reacções rápidas induzidas por transferência electrónica, de electrocatálise, etc.); (v) de *espectrofotometria de interrupção de fluxo* (aplicada à investigação dos mecanismos de reacções rápidas, *e.g.*, protonações, em Química de Coordenação); (vi) de *espectrometria de massa* (incluindo bombardeamento atómico rápido, FAB-MS) e seu acoplamento à cromatografia gasosa (GC-MS) (aplicada na identificação de compostos, *e.g.* produtos reaccionais, e na indução de reacções químicas em condições FAB); (vii) de *termogravimetria*. A *catálise a alta pressão e em fluido supercrítico* foi introduzida com a colaboração do colega António Palavra, especialista na construção de aparelhos capazes de operar nessas condições.

Como exemplos particulares de desenvolvimentos científicos atingidos, poderei referir os seguintes:

■ No domínio da *Catálise*, o estabelecimento de novos sistemas catalíticos de elevada actividade (a maior reportada até à data) na funcionalização de alcanos em condições suaves, de grande simplicidade (operando num só passo). Por exemplo, sistemas de carbonilação, naquelas condições, na presença de um oxidante peróxido, de alcanos em ácidos carboxílicos, *e.g.*, metano em ácido acético. A simplicidade da nossa via contrasta com a complexidade do processo industrial desta conversão que requer três fases distintas (*steam reforming* do metano ou do carvão, conversão do gás de síntese em metanol e carbonilação deste), operando em condições de elevada temperatura, e a terceira fase requerendo também catalisadores caros de Rh ou Ir (processos Monsanto ou Cativa, respectivamente). Descobrimos, *e.g.*, que a Amavadina, composto natural de vanádio existente em cogumelos do tipo *Amanita* (de função biológica ainda desconhecida e cujo estudo fora introduzido no Centro pelo Prof. Fraústo), e seus modelos ou complexos relacionáveis, actuam como catalisadores altamente eficientes (os mais activos) da carbonilação de alcanos, designadamente os mais inertes, metano e etano.

Um outro exemplo de grande potencial consiste no estabelecimento de sistemas aquosos (que podem ser livres de qualquer metal, *i.e.*, *metal free*) de hidrocarboxilação de alcanos em ácidos carboxílicos, nos quais a água actua não só como solvente, mas também como reagente, sendo a fonte do grupo hidroxilo do ácido.

Ainda mais um caso interessante consiste na descoberta de que a água pode actuar como catalisador de transferência protónica na funcionalização de alcanos, podendo, em condições controladas, acelerar fortemente a reacção.

Um outro desenvolvimento, muito recente, consiste na interpretação da acção catalítica, na oxidação de alcanos, de catalisadores de metais de não-transição (portanto sem actividade redox), *i.e.*, de como um catalisador com o metal

num estado fixo de oxidação (e.g., Al^{3+}) pode ser activo num processo de oxidação de um substrato.

- No domínio da *Electrocatalise*, o estabelecimento de um novo tipo de mecanismo (Michaelis-Menten) na electrocatalise, mediada pela Amavadina, que assim demonstrou poder actuar como uma enzima na oxidação de tióis.

- No domínio da *Síntese Orgânica Mediada por Centros Metálicos*, o estabelecimento de novos métodos de síntese de diversos compostos organo-azotados (e.g., oxadiazolinas, oxadiazoles, carboxamidas, acetilamidas, imidoilamidas, iminoisindolinonas, ftalimidas, ftalcianinas, ciano-olefinas ou tetrazoles) com vantagens sobre os métodos puramente orgânicos.

- No domínio da *Síntese Orgânica Assistida por Ligações de Hidrogénio*, a aplicação muito recente, pela primeira vez, destas ligações (assistidas por ressonância, i. e., *resonance assisted H-bond*, RAHB) na libertação de ligandos, na activação de um dinitrilo a ataque nucleófilo, e na isomerização E/Z de aril-hidrazonas.

- No domínio da *Síntese de Polímeros de Coordenação* e outras estruturas polimetálicas, a preparação de novos agregados homometálicos (por auto-agregação, *self-assembly*) ou heterometálicos (por auto-agregação directa, a partir de um metal em pó), por vezes hidro-solúveis, de acção catalisadora na oxidação de alcanos (no caso de compostos polinucleares de cobre mimetizando a *p*-metanomonooxigenase).

- No domínio da *Síntese de Compostos Anti-tumorais*, a obtenção de novos complexos de diversos metais (estanho, ruténio, cobalto, platina, etc.), com actividade superior à da cisplatina.

- No domínio da *Electroquímica Molecular*, o estabelecimento de numerosas correlações entre o potencial redox e a estrutura e composição de complexos, a estimativa de parâmetros electroquímicos medidores das propriedades electrónicas dos ligandos e centros metálicos, o estabelecimento de mecanismos de reacções rápidas de isomerização, de ácido-base e de libertação de ligandos induzidas por transferência electrónica (complexos de Re, Fe, W, Sn, Ru, etc.), bem como de processos de electrocatalise de cadeia de transferência electrónica (*Electron-Transfer-Chain Catalysis*, isomerização de complexo de Re) e de electrocatalise redox (mediada por complexos metálicos, na oxidação de tióis pela Amavadina, já acima referida, e na redução de halogenetos orgânicos). Nos casos de complexos de acção anti-cancerígena (Ru, Sn), os rearranjos estruturais e outras reacções moleculares observadas, induzidas por aceitação electrónica, bem como as relações entre o potencial redox e a actividade, são sugestivos de mecanismos de acção biológica por redução.

BQ: Possui também no seu currículo um número assinalável de patentes, um registo pouco habitual no meio académico em Portugal. Como vê a importância de patentear os resultados científicos obtidos?

AP: O registo de patentes constitui um dos indicadores relevantes de produtividade científica aplicada. É importante

em termos de reconhecimento do potencial valor industrial/comercial da investigação científica e é uma forma de atrair investimento da indústria para a Universidade e promover a relação entre estes sectores. Esta interacção ainda é pouco desenvolvida no nosso país onde não é fácil de promover.

O IST tem procurado dinamizar esta actividade, através da criação de um núcleo de apoio, mas será necessário diminuir muito a carga burocrática associada, a qual ultimamente tem levado quase à estagnação de pedidos de registo de patentes pelo nosso Grupo.

BQ: Que impactos têm tido estas patentes de processos e de catalisadores ao nível do relacionamento industrial da sua actividade científica?

AP: No nosso país não tenho sentido uma aproximação significativa do sector industrial. A situação é diferente internacionalmente e algumas empresas estrangeiras na Europa e na China manifestaram interesse em algumas das nossas patentes.

BQ: Uma outra faceta do Prof. Armando Pombeiro é a sua estreita ligação com a Academia das Ciências de Lisboa, onde tem sido um membro extremamente activo, quer em Portugal, quer a nível da sua representação internacional. Pode-nos falar um pouco sobre este envolvimento?

AP: A minha ligação à Academia das Ciências iniciou-se muito cedo, ainda na década de 70, após o meu regresso da Universidade de Sussex, quando procurei a Academia para me subsidiar numa visita àquela universidade no âmbito do protocolo de intercâmbio com a *Royal Society*. Tive a felicidade de ser recebido pelo Gen. Câmara Pina, que já referi, uma mente brilhante e curiosa, que se deixou cativar pelo tema da fixação de azoto que lhe descrevi. Das conversas que tivemos, resultou a organização do congresso sobre este tema e a edição do respectivo livro, anteriormente referidos.

A Academia estava então muito direccionada para a ciência de ponta (*cutting-edge*) e seus grandes desafios, e tive a sorte de chegar nessa ocasião com um tema que se enquadrava bem nos seus objectivos. Fui eleito membro correspondente quando era ainda muito jovem, o que me permitiu participar, ao longo de três décadas, em diversas actividades e desempenhar vários cargos nessa instituição.

Entre as actividades posso referir o serviço de publicações (incluindo as *Memórias* que estavam muito atrasadas e cuja publicação foi retomada e actualizada, para além de diversos livros sobre vários temas científicos e/ou de interesse nacional ou social), a organização de diversos congressos (sobretudo no âmbito do Instituto de Altos Estudos da Academia) e as representações em várias organizações internacionais, tais como o ICSU (*International Council for Science*), a ESF (*European Science Foundation*), a EASAC (*European Academies Science Advisory Council*) e a ALLEA (*All European Academies*). O envolvimento do nosso país, através da sua Academia das Ciências, nessas

organizações, é relevante, *e.g.*, em termos de visibilidade internacional e de participação na definição da política científica Europeia, mas a limitação de recursos financeiros não tem permitido à Academia uma representação continuada, resumindo-se a participações ocasionais, o que tem constringido seriamente o seu poder de intervenção. Neste contexto, o futuro também não parece risonho, em face das crescentes dificuldades financeiras gerais.

Como cargos desempenhados, poderei destacar os de Secretário-Geral (5 anos), de Secretário ou Vice-Secretário da Classe de Ciências (11 anos), e de Vice-Presidente da Classe de Ciências (9 anos), sobretudo o primeiro que é exigente de uma grande dedicação pessoal cuja conjugação com a actividade profissional no IST foi um sério desafio (a actividade na Academia nunca me deu direito a qualquer crédito).

O Secretário-Geral representa o órgão executivo da Academia e, como tal, deve dar seguimento às decisões do Conselho Administrativo (presidido pelo Presidente da Academia), do qual faz parte, embora naturalmente apoiado pelo Tesoureiro (também membro daquele Conselho) nas questões financeiras, e pelos Inspector da Biblioteca, Coordenador do Serviço de Publicações e Director do Museu, nos assuntos respectivos. A área do pessoal, este em número francamente insuficiente e por vezes com problemas de difícil resolução, pertence também ao seu pelouro e é exigente de uma sensibilidade particular nas relações humanas (é com agrado que reconheço o bom relacionamento que sempre mantive com os funcionários e a amizade com muitos deles).

Fiz então quase de tudo e aprendi muito, no exercício de funções desde as mais triviais até às de elevada responsabilidade, isto é, próprias de patentes “de cabo a general”. Foi uma experiência rica, diversificada e gratificante o envolvimento que então tive nas actividades desta Academia.

A Sociedade Portuguesa de Electroquímica constitui outra associação à qual me dediquei com empenho (fui um dos fundadores, o seu primeiro Secretário e Presidente em vários mandatos), tendo conseguido a colaboração entre as duas instituições em algumas iniciativas (realização de congressos internacionais e publicações), fomentando uma política de abertura da Academia das Ciências à sociedade científica.



Figura 5 – Medalhas da Universidade Técnica de Lisboa (centro) e do colar da Academia das Ciências de Lisboa (frente e verso: esquerda e direita, respectivamente)

BQ: Tendo chegado a um patamar tão elevado na sua carreira científica, quais são os seus projectos futuros?

AP: Continuar, enquanto puder e me deixarem..., a contribuir (das formas que se apresentem como viáveis) para o ensino e a investigação, a participar na organização de congressos científicos e acções de formação (*e.g.*, tipo escolas de verão), a publicar mais algum(ns) livro(s), a dedicar-me a actividades de associações científicas, e a ajudar aqueles que de mim possam precisar para o desenvolvimento das suas carreiras. Espero, no entanto, ter a capacidade de reconhecer quando já não estiver em condições adequadas para o fazer, e deixar então o lugar a outros mais aptos (na ilusão de que este não seja simplesmente extinto quando vagar, contrariando o que tem sistematicamente acontecido na Química...).

Gostaria ainda de me dedicar a outros tipos de actividades que tenho vindo a sacrificar em favor das que tenho realizado, designadamente pintar (o que daria uma grande alegria à minha Mãe), ler, escrever, viajar (será cada vez mais difícil) e ... dedicar-me mais aos entes que me são queridos.

BQ: Que mensagem quer deixar aos jovens químicos que estão neste momento a realizar os seus doutoramentos e que querem continuar ligados ao mundo da ciência?

AP: Entre os ensinamentos que fui obtendo durante uma vida já longa no meio científico, poderei seleccionar os seguintes.

Lembrem-se de que a Ciência é, por si só, um estímulo à criatividade e uma fonte de acção, dando-nos lições valiosas para a vida corrente.

Assim, não se deixem desanimar com as dificuldades que vão encontrar (e vão ser muitas...) e não se desculpem com determinismos Darwinistas.

Após a escolha cuidada de um objectivo e de uma via no seu prosseguimento, lutem com entusiasmo para vencerem os obstáculos que venham a condicionar o vosso trabalho. Uma vez vencida uma barreira de energia de activação, o sistema deverá/poderá evoluir favoravelmente, do ponto de vista energético e cinético.

Muitas vezes, resultados inesperados são bem mais interessantes do que os que prevíamos ou pretendíamos, mas temos de manter uma mente aberta para os descobrir ou reconhecer como tal, e usar a inteligência para deles tirar ensinamentos e proveito, mas sempre sem atropelar a ética que deve regular a conduta humana.

BQ: A entrevista chegou ao fim, muito obrigado pelo tempo disponibilizado e uma vez mais parabéns pelo Prémio.

AP: Agradeço a oportunidade que me deram e desejo o maior sucesso à Sociedade Portuguesa de Química e às suas iniciativas, incluindo a publicação do *Boletim*, em prol do desenvolvimento desta ciência.

Deixo ainda uma palavra final de agradecimento e amizade a todos os que comigo têm colaborado. É ao seu envolvimento, empenho e mérito que se deve este prémio.

NOTA BIOGRÁFICA DO PROFESSOR ARMANDO J. L. POMBEIRO

Natural do Porto (1949), licenciou-se em Engenharia Química (1971) pelo Instituto Superior Técnico (IST), doutorou-se (D. Phil, 1976) na Universidade de Sussex (U.K.) e é (desde 1989) Professor Catedrático do IST, instituição onde sempre desenvolveu a sua carreira profissional.

Desenvolve a sua investigação no Centro de Química Estrutural (CQE) desde a sua fundação, sendo coordenador/fundador do Grupo de “Química de Coordenação e Electroquímica Molecular, Síntese e Catálise”.

Distinções, Cargos e Comissões

Membro Efectivo da Academia das Ciências de Lisboa (1988-), onde tem desempenhado diversos cargos directivos, executivos e consultivos; Representante na ICSU (*International Council for Science*) e na ESF (*European Science Foundation*); Membro do EASAC (*European Academies Science Advisory Council*); Membro do Conselho Superior de Ciência, Tecnologia e Inovação (2004-05) e do Conselho Superior de Ciência e Tecnologia (1995). Membro da Comissão de Avaliação Externa das Ciências Físicas das Universidades Portuguesas (2002-03); Membro do Painel de Avaliadores Externos do Departamento de Engenharia de Processos Químicos da Universidade de Pádua (2005); Membro de painéis consultivos e de avaliação do Programa Científico da NATO.

Professor Catedrático (*Chair Professor*) convidado da *National Taiwan University of Science and Technology* (2007-). Coordenador do Programa Doutoral da FCT em “Catálise e Sustentabilidade (CATSUS)” (a iniciar em 2014). Coordenador da Área Científico-pedagógica de “Síntese, Estrutura Molecular e Análise Química” do Departamento de Engenharia Química (e Biológica) (desde 2009, IST). Membro das Comissões Científicas dos cursos de Doutoramento e Mestrado em Química do Departamento de Engenharia Química (e Biológica) (desde 2009, IST). Coordenador do Programa de Doutoramento em Química (IST, 2000-03).

Responsável do Programa do *Dual Master* em Química do IST com a Universidade de Camerino (2009-). Membro da Comissão Directiva/Coordenadora do CQE.

Sociedades científicas

Co-fundador da Sociedade Portuguesa de Electroquímica, onde tem desempenhado diversos cargos (Presidente, Secretário); fundador da revista *Portugaliae Electrochimica Acta*; proponente/fundador dos Prémios “Sociedade Portuguesa de Electroquímica” e “Jovem Investigador em Electroquímica” desta Sociedade. Co-fundador da Sociedade Iberoamericana de Electroquímica e representante nacional (1992-96) nesta Sociedade; Membro da *International Society of Electrochemistry* (ISE); Membro Afiliado da IUPAC; Membro da Sociedade Portuguesa de Química; *Fellow* da *Royal Society of Chemistry*; Membro da *American Chemical Society*.

Organização de congressos e escolas

Chairman e/ou Membro da Comissão Organizadora e/ou Científica em ca. 40 congressos e simpósios internacionais (e.g., a recente *XXV International Conference on Organometallic Chemistry*, Lisboa, 2012, com mais de 1200 participantes de 54 países, de que foi *Chairman*), e em ca. 12 “escolas” internacionais.

Investigação científica

As suas actividades de investigação, nas áreas gerais das Químicas de Coordenação, Inorgânica, Bioinorgânica e Organometálica, Catálise (homogénea e suportada) e Electroquímica Molecular, têm-se desenvolvido em vários domínios cujo estudo sistemático, com frequência, introduziu no seu Centro de investigação.

Projectos recentes de investigação sob a sua responsabilidade (ou co-responsabilidade)

“Funcionalização de Alcanos num Só “Passo” e em Condições Suaves” (PTDC), “Síntese e Catálise Químicas” (Programa Nacional de Re-equipamento Científico), “Carbonilação Catalítica de Alcanos” (POCI), “Centros Metálicos em Síntese de Significado Farmacológico” (POCTI), “Transition Metal Chemistry and Catalysis in Aqueous Media” (Rede Europeia, Programa Marie-Curie de Recursos Humanos e Mobilidade).

Publicações e lições convidadas

Autor de 1 livro, autor ou co-autor de ca. 585 publicações de investigação científica (incluindo ca. 75 capítulos de livros ou artigos de revisão), 33 patentes, 510 comunicações em conferências, 85 lições convidadas (plenárias ou *keynotes*) em conferências internacionais, 60 lições ou seminários convidados em instituições universitárias, em geral estrangeiras (para além das aulas proferidas). Os seus trabalhos de investigação receberam acima de 10000 citações (nos últimos anos, ca. 1000 citações/ano), *h-index* = 48 (*ISI Web of Knowledge*, Maio 2013).

Autor de ca. 14 trabalhos de carácter pedagógico e de ca. 20 trabalhos sobre tópicos diversos (o sistema português de ciência e tecnologia, a Academia das Ciências de Lisboa, a investigação electroquímica em Portugal, biografias, etc.).

Actividade editorial

Editor de 3 livros internacionais. Membro do Corpo Editorial de sete revistas, coordenador (*Guest Editor*) do volume especial da *Inorganica Chimica Acta* em homenagem ao Prof. Fraústo da Silva (vol. 356, 2004). Membro da Comissão de Publicações/Edições da Academia das Ciências de Lisboa (1981-2007).

Orientação de investigação

Orientou 21 teses de doutoramento e 16 de mestrado, ca. 46 investigadores doutorados (em geral bolsheiros de pós-doutoramento estrangeiros) e ca. 45 investigadores mestres, licenciados ou estudantes (ca. 33 bolsheiros estrangeiros Marie Curie, Erasmus, etc., para além daqueles que já obtiveram o grau de Doutor ou Mestre).

Prémios

Madinabeitia-Lourenço (2013, Real Sociedade Espanhola de Química), Ferreira da Silva (2012); Estímulo à Excelência (2005); Prémio Científico UTL - Santander Totta (2007) (1.ª edição; investigador com maiores produtividade e factor de impacto, em ciências químicas, biológicas, de materiais, e outras afins).

ANTIGUIDADES CIENTÍFICAS

QUÍMICA, BIOQUÍMICA E A GLOBALIZAÇÃO DO pH

No início do século XX reinava entre a comunidade química alguma perplexidade sobre como classificar as forças dos ácidos e das bases. Apesar de vários investigadores já terem sugerido que a concentração em ião hidrogénio podia servir para tal fim, não era fácil utilizar os valores numéricos das concentrações como escala. Em 1909, o bioquímico dinamarquês Søren Sørensen (1868-1939), que dirigia os Laboratórios Carlsberg, em Copenhaga, sugeriu que a forma negativa do logaritmo decimal da concentração de H^+ definia uma escala da potência de ácidos e bases representada por pH, com o valor 7 a representar a neutralidade e 1 e 14 os extremos de acidez e alcalinidade, respectivamente [1].



Søren Sørensen (1868-1939)



Leonor Michaelis (1875-1949)

Esta escala de pH foi adoptada pela comunidade bioquímica, da qual Sørensen fazia parte, dado possibilitar a interpretação do efeito tampão dos tecidos vivos. A divulgação deste conceito foi possível sobretudo devido ao trabalho de Leonor Michaelis (1875-1949), bioquímico alemão, que foi autor de um livro sobre pH em 1914, que é citado no trabalho original de Johannes Brønsted (1879-1947) sobre ácidos e bases [2].

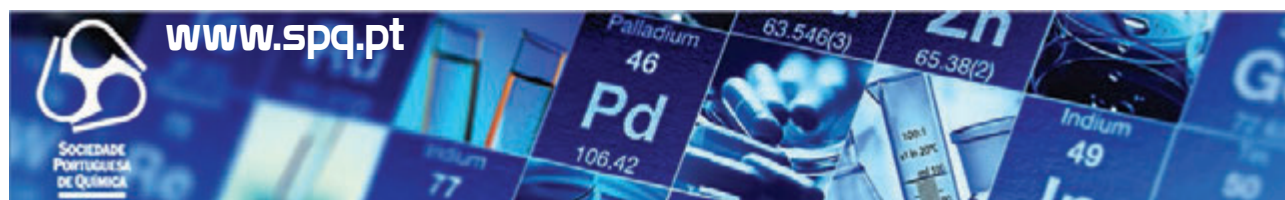
A “peregrinação” de Leonor Michaelis [3], que foi professor na Universidade de Berlim desde 1908 até 1922, ano em que começou a ensinar na Escola Médica de Nagoya (Japão) e onde se manteve até 1926 quando emigrou para os Estados Unidos da América, contribuiu para a divulgação do conceito de pH entre a comunidade química. No entanto, só o desenvolvimento por Arnold Beckman (1900-2004), em 1935 nos Estados Unidos da América, de um aparelho portátil para a leitura directa do valor de pH veio consolidar a utilização do conceito de pH.

Curiosamente, Leonor Michaelis ficou sobretudo conhecido como um dos autores da famosa equação de cinética enzimática que relaciona a velocidade de uma reacção catalisada enzimaticamente com a concentração do substrato enzimático, conhecida como equação de Michaelis-Menten, a qual completa este ano precisamente 100 anos. O outro co-autor foi Maud Leonora Menten (1879-1960), licenciada em medicina (1911) e uma das primeiras mulheres canadianas a doutorar-se (1916) em bioquímica, e que viria a distinguir-se por publicar em 1944 o que pode ser considerada a primeira separação de proteínas por electroforese [4].

REFERÊNCIAS

- [1] S. Sørensen, *Biochem. Z.* **21** (1909) 131-304
- [2] J.N. Brønsted, *Rec. Travaux Chim. Pays-Bas* **42** (1923) 718
- [3] W.H. Brock, “The Fontana History of Chemistry”, Fontana Press, London, Great Britain, 1992, pg 385.
- [4] <http://path.upmc.edu/divisions/chp/Menten.htm> (acedido em 1/10/2013)

António J.G. Mendonça
(mendonca@ubi.pt)



ORDENAR AS UNIVERSIDADES IBERO-AMERICANAS: QUANTIDADE, QUALIDADE E DIMENSÃO

Susana Jarmelo¹, Tânia F. G. G. Cova², Alberto A. C. C. Pais^{2,3}, J. Sérgio Seixas de Melo^{1,2,3*},
Sebastião J. Formosinho^{2,3}

¹ Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

² Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra

³ Centro de Química de Coimbra, Universidade de Coimbra
sseixas@ci.uc.pt

Os indicadores de quantidade e qualidade são indissociáveis de qualquer estabelecimento de *rankings* de instituições geradoras de conhecimento científico. Neste estudo é feita uma análise comparativa da produção científica de 51 instituições de Ensino Superior no universo ibero-americano tendo em conta dados provenientes do *ranking SCImago*, aferidos das bases *Thomson ISI Web of Science (WoS)* e *Essential Science Indicators (ESI)*. Especificamente, o estudo contempla o tratamento e interpretação crítica dos dados da ciência produzida em seis países ibero-americanos (Portugal, Espanha, Brasil, Argentina, México e Chile) e estabelece critérios que perspectivam a classificação das suas instituições.

1. INTRODUÇÃO

A análise da produção científica e o reconhecimento dos investigadores junto da comunidade científica assentam, em grande medida, na aplicação de diversos indicadores bibliométricos, que quantificam o seu impacto científico. Estes indicadores acompanham o desenvolvimento das diversas áreas científicas e são realimentados pelos próprios resultados de investigação. Numa perspectiva individual, a fórmula de Hirsch, publicada em 2005 [1], avalia os investigadores, combinando a produtividade traduzida pelo número de artigos e o impacto da pesquisa, através do número de citações. Possivelmente, uma das razões pelas quais este índice se afirmou tão rapidamente, a despeito de críticas e sugestões alternativas promovidas pelo próprio sucesso, tem a ver com o facto de combinar quantidade e qualidade. Esta combinação é bem mais difícil de conseguir nas avaliações de carácter institucional. Mas é possível, num dado período, estimar o índice-h de uma instituição numa dada área científica.

Existem, actualmente, várias bases de dados que disponibilizam indicadores e resultados de análise bibliométrica, sendo a mais conhecida a *Web of Science (WoS)* da *Thomson Reuters*. No entanto, existem outras fontes e ferramentas que também fornecem dados com base nas citações, como a *Scopus* da Elsevier e a *Google Scholar Metrics (GSM)*.

A validade da aplicação dos indicadores de produtividade científica tem sido alvo de crítica por parte de vários autores. Em Portugal, esta discussão ganhou visibilidade em 2005 quando o jornal *Público* disponibilizou um extenso trabalho sobre *rankings* das universidades portuguesas baseado num estudo de Luís Sousa Lobo (antigo Reitor da Universidade Nova de Lisboa), entregue ao Conselho de Reitores das Universidades Portuguesas (CRUP) e que circularia nos meios académicos portugueses [2]. O estudo, baseado num *ratio* entre a produção científica bruta total

(retirada da base de dados *Thomson ISI Web of Science* que na altura se tornara disponível à comunidade académica portuguesa) e o número de docentes de carreira das diferentes universidades portuguesas, colocava as Universidades de Aveiro e do Algarve, cujo *ratio* seria mais elevado, mais próximas das universidades consideradas “Universidades de Investigação”. Em termos globais de produção (número de artigos) seriam as Universidades do Porto e Técnica de Lisboa que lideravam. O estudo, caracterizado por alguma polémica, conduziu a inúmeros comentários de cientistas e reitores, alguns publicados nos dias seguintes no mesmo jornal.

A questão da avaliação da qualidade da ciência produzida pode parecer demasiado académica ou hermética. No entanto, não efectuar este exercício é, nos dias de hoje, ainda mais redutor. De facto, a forma como as universidades (e a respectiva investigação) se vão orientar no futuro está claramente relacionada com uma divisão entre as que serão consideradas de investigação e aquelas cuja vertente principal será o ensino.

O presente estudo pretende efectuar uma análise crítica do *ranking* das instituições ibero-americanas proposto pela *SCImago* [3], com base na produção científica dessas instituições. Trata-se de um exemplo de abordagem que se pretende objectiva e que tenta evitar uma complexa e possivelmente inconclusiva incursão no mundo dos também designados “rankings” (*QS*, *Times*, etc.). Têm surgido vários, baseados em características, algoritmos e propósitos bem distintos e com óbvias dificuldades de validação. Refira-se aqui que a subtil variação nos significados da palavra “ranking”, que vai desde simples ordenação, posicionamento, até lista ordenada ou metodologia para a sua construção contribui para alguma falta de clareza na exposição. No que se segue, far-se-á um esforço para que não haja ambiguidade.

Note-se que existem consequências práticas do posicionamento nas listas de impacto institucional. A ordenação

baseada num critério único de produtividade em bruto relativo ao quinquénio 2007-2011 parece ter contribuído para a decisão de suspensão do programa “Ciência sem Fronteiras” (CsF) para Portugal [4]. Mostrar-se-á neste estudo que a ordenação efectuada por uma qualquer metodologia deve ser cuidadosamente analisada e deve, optimamente, incluir critérios de qualidade e produtividade.

2. QUANTIDADE E QUALIDADE

O conjunto de universidades analisadas é constituído pelas 50 primeiras instituições do *ranking* ibero-americano *SCImago* relativo ao período 2007-2011. O Instituto Superior Técnico, não contemplado no estudo *SCImago*, é também considerado, dada a sua relevância a nível das 50 universidades analisadas. O universo de universidades/institutos passa assim a ser de 51.

Os dados sobre os quais a *SCImago* actua é proveniente da base de dados *Scopus*, enquanto que os dados recolhidos para análise advêm da base de dados *ISI Web of Knowledge* (WoK). No WoK discriminam-se duas vias para obter o conjunto de dados: (i) pesquisa do número de publicações científicas no *ISI Web of Science*, no mesmo período da *SCImago* (2007-2011), (ii) identificação das áreas de *ranking* ESI (*Essential Science Indicators*) de cada instituição, número de artigos e número de citações para cada área de *ranking*, bem como o número total de artigos e citações da instituição no campo “All Fields” (consulta ESI a 1 de Maio de 2013). O facto da WoK permitir recolher, de um modo fácil, esta informação promoveu o seu uso no presente estudo.

A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos para a Universidade de Coimbra (UC). De acordo com a metodologia proposta, a UC possui 11 áreas de *ranking*. No período de 1 de Janeiro de 2003 a 28 de Janeiro de 2013, “Chemistry” é a disciplina que apresenta o maior número de artigos (ca. de 1600) e também maior número de citações (14809). Durante este período, a UC publicou 8945 artigos (“All

Tabela 1 – Número de artigos e citações correspondentes às áreas de *ranking* da Universidade de Coimbra no período de 1 de Janeiro de 2003 a 28 de Janeiro de 2013 (consulta ESI a 1 de Maio de 2013)

Áreas <i>Rk</i>	Artigos	Citações
1. Chemistry	1600	14809
2. Physics	1005	9872
3. Clinical Medicine	948	9165
4. Neuroscience & Behavior	359	7682
5. Biology & Biochemistry	456	6143
6. Engineering	1028	5304
7. Pharmacology & Toxicology	312	4451
8. Environment & Ecology	434	3811
9. Plant & Animal Science	491	3669
10. Materials Science	519	3151
11. Agricultural Science	111	1066
All Fields	8945	80877

Fields”), com um total de 80877 citações. Tal corresponde a perto de 10 citações por artigo, um número característico de grande prevalência.

Com base na metodologia usada (dados ESI e WoS) é possível fazer uma análise crítica dos dados da *SCImago*. De facto, numa primeira fase podemos comparar os dados brutos, relativos ao número de publicações, introduzindo também o número de áreas no *ranking*, que designaremos por *Rk*¹[5]. A Tabela 2 apresenta como exemplo o número de publicações *SCImago* vs. número de publicações WoS, para as 30 primeiras universidades do *ranking SCImago*. Nesta tabela é igualmente contabilizado o *Rk* para cada uma das instituições. Por comparação, verifica-se que as cinco primeiras universidades do *ranking SCImago* permanecem na mesma posição utilizando o que podemos designar por “*ranking* WoS”. Este resultado, valida a comparação entre o *ranking SCImago* e a WoK, em termos de número de artigos e mostra também que a quantidade é necessariamente geradora de qualidade, não sendo no entanto o critério único ou mesmo determinante. No entanto, da observação da Tabela 2 resultam outros dados merecedores de relevo. As universidades de grande dimensão, consideradas como “Universidades Clássicas”, abrangem um grande número de áreas científicas, apresentando *Rk*'s iguais ou superiores a 15, o que acompanha igualmente o *ranking* de produtividade em bruto. De facto, as 10 primeiras universidades surgem com *Rk*=15. A excepção é a Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho com *Rk*=12. Por outro lado, universidades com *Rk*=17, como as Universidades de Valência e Autónoma de Madrid surgem no *ranking SCImago* em posições abaixo das 10 primeiras. Este facto sugere que os critérios de qualidade são de algum modo subvalorizados quando é efectuada uma análise exclusivamente baseada no número de artigos, como é o caso da ordenação resultante do *ranking SCImago*. No entanto, é importante salientar que a análise feita pela *SCImago* contém parâmetros diferenciadores indicadores de qualidade. Um desses parâmetros de qualidade é definido pela fracção do número de publicações que se encontram no primeiro quartil das revistas com maior impacto e designado por Q1 e que assenta na fracção de artigos publicados em revistas pertencendo ao primeiro quartil numa determinada categoria científica, e ordenadas pelo indicador SJR (*SCImago Journal Rank*). Porém, a ordenação das instituições resultante no *ranking* é normalmente estabelecida com base apenas no número de artigos.

3. QUANTIDADE E DIMENSÃO

O índice *SCImago* é geralmente utilizado para dispor as instituições de investigação por ordem de número de publicações. Este parâmetro tem a vantagem de permitir a comparação directa, e podemos aceitar que uma instituição que publica maior número de artigos está associada a um maior impacto dentro da comunidade científica. Outros parâmetros constantes deste índice incidem sobre a quali-

¹ O ESI organiza as áreas científicas de cada instituição (*Field Rankings*) que se localizam em citações no 1% de topo a nível mundial na respectiva área, aquilo que será aqui denominado por *Rk*.

Tabela 2 – Número de publicações *SCImago* vs. *WoS*, para as 30 primeiras universidades do *ranking SCImago*. O número de áreas de *ranking ESI* é também contabilizado. Os números indicados à esquerda da instituição reportam-se à ordenação do *ranking SCImago* para o período de 2007-2011

Instituição	#Artigos <i>SCImago</i>	#Artigos <i>WoS</i>	Alteração posição	#Áreas <i>Rk</i>
01-Univ São Paulo	47833	44777	=	19
02-Univ Nacional Autónoma México	19349	17648	=	18
03-Univ Barcelona	16914	16815	=	19
04-Univ Estadual Campinas	16885	14996	=	15
05-Univ Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho	16810	14277	=	12
06-Univ Fed Rio de Janeiro	14702	12860	-2	17
07-Univ Autónoma Barcelona	14576	13506	+1	19
08-Univ Complutense Madrid	14351	13101	+1	18
09-Univ Porto	12904	10790	-2	16
10-Univ Fed Rio Grande do Sul	12223	11290	+1	15
11-Univ Politécnic Catalunha	12010	8188	-6	7
12-Univ Valência	11928	11281	+2	17
13-Univ Autónoma Madrid	11678	10129	+1	17
14-Univ Técn Lisboa	11553	8186	-4	6
15-Univ Buenos Aires	11452	9808	+2	16
16-Univ Fed Minas Gerais	10711	9478	+1	13
17-Univ Granada	10285	9589	+3	14
18-Univ Politécnic Valencia	9441	7453	-3	7
19-Univ Fed São Paulo	9433	9199	+3	7
20-Univ Sevilha	8861	7316	-3	13
21-Univ Politécnic Madrid	8760	5515	-3	7
22-Univ Zaragoza	8504	7493	+2	11
23-Univ Chile	8354	7889	+4	12
24-Univ País Vasco	8312	7433	+2	7
25-Univ Santiago de Compostela	7507	6388	=	13
26-Univ Lisboa	7220	5613	-4	10
27-Univ Coimbra	7162	6902	+3	11
28-CINVESTAV IPN	7072	5792	+1	3
29-Univ Aveiro	6743	5837	+3	8
30-Univ Fed Santa Catarina	6521	5333	-3	9
Inst SuperTécnic ^a		5775		5

^a O Instituto Superior Técnico, não contemplado no estudo *SCImago*, é também considerado, dada a sua relevância a nível das 50 universidades analisadas.

dade da produção, por exemplo um já antes referido (Q1) e que assenta na fracção de artigos publicados em revistas pertencendo ao primeiro quartil. Este tipo de parâmetros parece sugerir uma combinação com o correspondente à produção global, permitindo-nos combinar qualidade e quantidade. Naturalmente, que uma forma directa de proceder corresponde a multiplicar a fracção da produção de qualidade pela produção total, originando o total de produção de qualidade. Trata-se de um indicador que, naturalmente, dá conta também da dimensão da instituição e é fácil de perceber que se todas as instituições tivessem, por hipótese, o mesmo Q1, as maiores apareceriam nos lugares cimeiros do ranking. A discriminação que resta é, portanto, a das grandes instituições com baixo Q1 e a das pequenas com elevado Q1, mas o impacto na ordenação é normalmente pequeno. A ordenação directa através deste

indicador é ainda mais problemática, porque existem instituições diminutas, com produtividade quase nula mas de alto impacto que surgem, destacadas, no topo da tabela.

Vemos, assim, a necessidade de normalizar a produção (global ou de qualidade) com grandezas de outro tipo, como já defendido anteriormente em diferentes trabalhos [6,7]. A mais óbvia será naturalmente o número de docentes ou de investigadores, mas o financiamento poderá ser uma alternativa. Note-se, no entanto, que esta última peca pelo facto de ser difícil de estabelecer em estudos efectuados a partir do exterior da instituição. O mesmo sucede com o número de investigadores, que é difícil de avaliar. O número de docentes numa universidade portuguesa pode ser determinável, mas possivelmente já se torna mais complexo determinar o número de pós-doutorados englobados

nos diversos programas ou projectos. Existe a esperança de resolver tal dificuldade com base em plataformas tipo *DeGóis* (Portugal) ou *Currículos Lattes* (Brasil), mas entender tal aproximação para instituições arbitrárias em qualquer zona do planeta parece mais difícil. No entanto, estratégias para recolher o máximo de informação têm de estar na ordem do dia, especialmente num país em que os nossos departamentos de investigação são, tipicamente, de dimensões reduzidas e, portanto, a sua qualidade só pode ser aferida se normalizada pelo número de pessoas envolvidas. E, acrescentamos, pelo financiamento atribuído às mesmas instituições.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A maior parte dos procedimentos de *ranking* estão associados à produção global, com ou sem avaliação da respectiva qualidade, e portanto dependem da dimensão institucional. Portugal ficará, assim, tipicamente mal colocado face a países com maiores populações e universidades com maior número de docentes e alunos (vejam-se as Universidades de S. Paulo ou de Barcelona, acima, de dimensões cerca de 5 e 2 vezes, respectivamente, maiores que a da Universidade de Coimbra, por exemplo). Ficará ainda mais mal colocado face a instituições de investigação de nível (global) nacional, como sejam o CNRS, o CSIC ou o *Max Planck Institute*, algumas delas a atravessar presentemente forte crise.

Torna-se, pois, necessário crescer, mas torna-se também necessário normalizar. Produzimos com investigadores

que devem ser contabilizados, como contabilizados devem ser os dos pares estrangeiros com que nos queremos comparar. Temos também de caracterizar as nossas instituições, e parâmetros como o *Rk* podem ser extremamente úteis para, por exemplo, julgar da abrangência. Só a inspecção deste parâmetro levaria imediatamente à conclusão que deveria ser tentada a junção da Universidade Técnica com a Clássica, em Lisboa. O que foi feito!

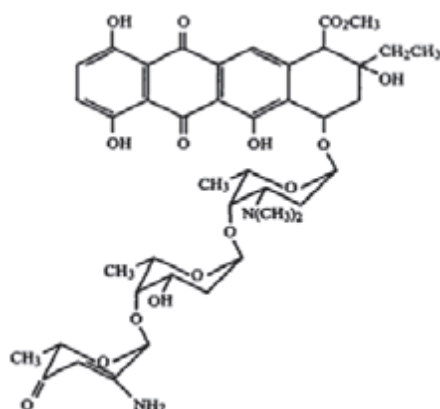
REFERÊNCIAS

- [1] J. E. Hirsch, "An index to quantify an individual's scientific research output", *PNAS* **102** (2005)16569–16572
- [2] Notícia Público, 25 de Julho de 2005 (fonte: <http://www.publico.pt/educacao/noticia/aveiro-lidera-investigacao-universitaria-em-portugal-1229006>)
- [3] <http://www.scimagoir.com> e <http://scimagoir.com/country/>
- [4] Notícia Estadão.com.br, 5 de Março de 2013 (fonte: <http://www.estadao.com.br/noticias/impresso,bolsistas-fazem-curso-pior-empotugal,1004388,0.htm>)
- [5] T.F.G.G Cova, A.A.C.C. Pais, S.J. Formosinho, "Iberian universities: a characterisation from ESI rankings", *Scientometrics* **94** (2013)1239-1251
- [6] E.S. Vieira, J.A.N.F. Gomes, "The journal relative impact: an indicator for journal assessment", *Scientometrics* **89** (2011) 631–651
- [7] E.S. Vieira, J.A.N.F. Gomes, "An impact indicator for researchers", *Scientometrics* **89** (2011) 607–629

ANTIGUIDADES CIENTÍFICAS

MOLÉCULAS NATALÍCIAS

O **ácido boémico** é uma mistura de compostos químicos com propriedades anti-tumorais cujos nomes derivam de personagens da ópera *La Bohème* (1896) de Giacomo Puccini. Assim, esta mistura inclui compostos como *marcelomicina* (Marcello), *musettamicina* (Musetta), ***rudolfomicina*** (Rodolfo), *mimimicina* (Mimí), *collinemicina* (Colline), *alcindoromicina* (Alcindoro) e *schaunardimicina* (Schaunard).



Rudolfomicina

Atente-se na subtileza de ***rudolfomicina***, que não deriva exactamente do nome do personagem Rodolfo de *La Bohème* mas antes de Rudolph, *the Red-Nosed Reindeer*. Com efeito, por degradação da rudolfomicina obtém-se um açúcar, correspondente ao da extremidade da molécula de origem, o qual foi designado por ***rednose***.

Este nome, algo insólito para um composto químico, talvez possa ser explicado se atendermos a que o manuscrito original foi submetido ao *Journal of the American Chemical Society* no dia 21 de Dezembro de 1978... em plena época natalícia.



Rednose

(adaptado de <http://www.chm.bris.ac.uk/sillymolecules/sillymols2.htm> e de *J. Am. Chem. Soc.* **101** (1979) 7041-749)

João Paulo André
(jandre@quimica.uminho.pt)

A TORRE DAS CIÊNCIAS

Raquel Gonçalves Maia*

Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa
rmgonc@gmail.com

A Torre das Ciências existe mesmo; e está em permanente construção. Não, não é uma Torre de Babel – o céu há muito que foi atingido... Não é cônica, não é cilíndrica, nem tem uma qualquer forma regular. Não tem por base uma ciência, nem por patamares outras. Espraia as ciências formais, dilui as margens das ciências físicas e das ciências da vida, abraça laivos das ciências sociais, da filosofia e da história das ciências, gera ciências aplicadas... O conhecimento científico não pode ser uma Torre de Marfim. Há um propósito real nas ciências: a construção de uma atmosfera propícia à difusão do conhecimento que elimine erros conceptuais graves e permita aos alunos, e ao público em geral, usufruir de um processo de educação com qualidade. Afinal, às ciências se deve a maior modificação das condições de vida humana nos últimos séculos. E a Química onde está?

Há “centralidade” na Química. São vários os mapas de ciência que o afirmam. Assim o comprova o Mapa de Consenso, em termos da intermediação da Química entre disciplinas científicas, da sua preponderância na emergência e desenvolvimento de ciências interdisciplinares e, conseqüentemente, nos requisitos exigidos pelos currículos de cursos universitários.

1. INTRODUÇÃO

Segundo a Bíblia, há muitos séculos, homens houve que construíram uma enorme torre com a intenção de atingirem os céus e entrarem nos domínios de Deus. Chamou-se – todos o sabem – Torre de Babel. Babel significa numa eventual língua semítica “o portão de Deus”. Mas, simbolicamente, a palavra Babel é ainda mais rica, traduz a “confusão”. A falta de equilíbrio, a presunção, arrasta o homem para o caos, impede a existência de consensos, cada um diz o que o outro não entende. Esta é uma história muito antiga da humanidade, mas dir-se-ia fabricada nos dias de hoje. A Torre de Babel existe mesmo e, infelizmente, está em permanente construção...

No século XIX surgiu uma escola de pensamento que se designa por “cienticismo” ou “cientismo”, muitas vezes identificada com “religião dos cépticos” ou “religião da Ciência”. Os cientistas praticam uma visão científica absoluta do mundo; segundo eles, a ciência explica a totalidade dos fenómenos do universo. Os cientistas sofrem do mesmo pecado que os homens que tentaram construir a Torre de Babel, creditam à ciência uma abrangência injustificada, sem fronteiras, sem espaço para a Metafísica e para a Teologia. Mas nem tudo é mau. A verdade é que também não deixam espaço para especulações sobrenaturais e paranormais, dificultando o trabalho de magos, bruxas e adivinhadores do futuro.

A atitude metodológica que tende a considerar o método experimental e a análise quantitativa como a metodologia de maior aproximação à verdade é a base das ciências formais e das ciências naturais. A ciência tem por base a

razão, mas esta é marcada por condicionantes temporais, culturais e espaciais.

Antes de continuarmos vale a pena clarificar que incluímos: (i) a Matemática e a Computação nas “ciências formais”; (ii) a Física, a Química e a Astronomia nas “ciências físicas”; (iii) a Biologia, a Bioquímica e genericamente todas as ciências começadas por “bio”, “zoo”, “eco”, “neuro” e “imuno” nas “ciências da vida”; (iv) todas as ciências que estudam a natureza física do Universo, seja o homem como parte integrante deste, seja o seu meio envolvente, (ii) e (iii), nas “ciências naturais”; (v) a Medicina e as Engenharias nas “ciências aplicadas”; (vi) a Antropologia, a Arqueologia, a Economia e as Ciências Políticas nas “ciências sociais”; (viii) a Filosofia e, genericamente, as Artes e as Letras, nas “humanidades”.

2. A TORRE DAS INFLUÊNCIAS FELIZES

Auguste Comte (1798-1857) e o Positivismo estabeleceram que a ciência era uma composição de domínios de fronteiras fixas; e mais estabeleceram: que havia uma hierarquia nas ciências, classificadas estas desde a base – as Ciências Sociais – até ao topo – a Matemática (Figura 1).



Figura 1 – A “Torre das Ciências” de Auguste Comte

* Professora Catedrática aposentada

A Matemática, ocupando o topo, estava mesmo a tocar o portão dos céus... Uma torre vertical, sim, sem ponta de ramificação e na estranha opinião de Comte, concluída. Salvo raras e pequenas exceções, a ciência era, a seu ver, um saber terminado. Muito provavelmente a “higiene cerebral” a que Comte se auto impôs – e que lhe travou o acesso a toda a espécie de literatura nova após ter completado trinta anos – tê-lo-á cegado em relação à dinâmica científica tão florescente no século XIX [1,2]. Era o determinismo universal, puro e duro, com uma lógica de saberes confinados a compartimentos estanques...

Em 1939, o genial John Desmond Bernal (1901-1971), o *Sage*, pioneiro da cristalografia de raios X aplicada ao estudo da estrutura de moléculas bioorgânicas, num trabalho, igualmente pioneiro de sociologia das ciências, apresentou um intrincado mapa com uma estrutura algo hierarquizada das ciências (a Matemática foi omitida neste estudo) segundo dois eixos: um eixo vertical determinava dois domínios de investigação, as ciências fundamentais e as ciências aplicadas, estando estas dependentes daquelas; um eixo horizontal definia um primeiro sector, o das ciências físicas, seguido do sector das ciências biológicas e, finalmente, do das ciências sociais (Figura 2). Cerca de 50% do mapa fica coberto pelas ciências físicas e suas aplicações, mostrando bem a clara dominância que o autor lhes atribuiu [3,4].

Depois do mapa das ciências de Bernal, outros mapas se sucederam e, por muito objectivos que pretendam ser, sempre acabam revelando alguma subjectividade relativa à prática do seu autor; e do seu leitor... Não querendo ser excepção à regra, a nossa apresentação seguinte recaiu sobre o trabalho exposto pelos cientistas Alexandru Balaban e Douglas Klein, em 2006, num artigo cujo subtítulo é “How are different sciences related?”. Trata-se de um esquema de ordenação das ciências, necessariamente parcial, com um significativo grau de hierarquização e de ramificação [5]. Na Figura 3, não incluímos as disciplinas dentro de um casulo e só aparentemente é que o mapa é bidimensional.

Posteriormente, Richard Klavans e Kevin W. Boyack, em 2009, publicaram um interessante estudo de “consenso”

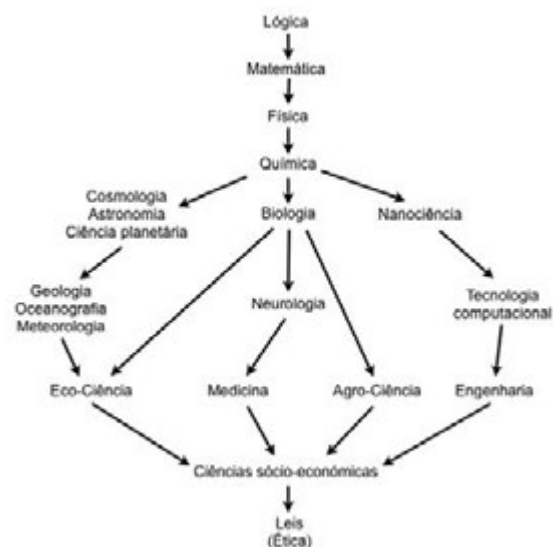


Figura 3 – Diagrama das Ciências de Balaban e Klein

baseado na análise de uma vintena de propostas de mapas de ciência existentes, uns declaradamente lineares, outros cêntricos e outros não-cêntricos [6]. Os autores preferem falar em “consenso” ao invés de convergência, uma vez que a procura de uma solução comum (em termos de forma, conteúdo e interligações) seria muito difícil se não impossível [7,8]. Optaram, então, por utilizar um padrão menos elevado, segundo o qual agregam resultados de vários mapas individuais desde que partilhem um largo conjunto de características em comum. Tal agrupamento gerou 16 áreas científicas, assim designadas por ordem alfabética: Biologia (B), Bioquímica (Bi), Ciência Computacional (CC), Ciências Sociais (CS), Doenças Infecciosas (DI), Engenharia (E), Especialidades Médicas (EM), Física (F), Geociências (G), Humanidades (H), Matemática (M), Neurociência (N), Psicologia/Psiquiatria (PP), Química (Q), Química Física (QF), Serviços de Saúde (SS).

A título de exemplo, o caso que atrás referimos ficou disposto como se vê na Figura 3. Verifica-se que a maioria das ciências proposta inicialmente fica codificada por uma única área científica. No entanto, ocorrem por vezes situações que são descritas por mais do que uma área; a Medicina,

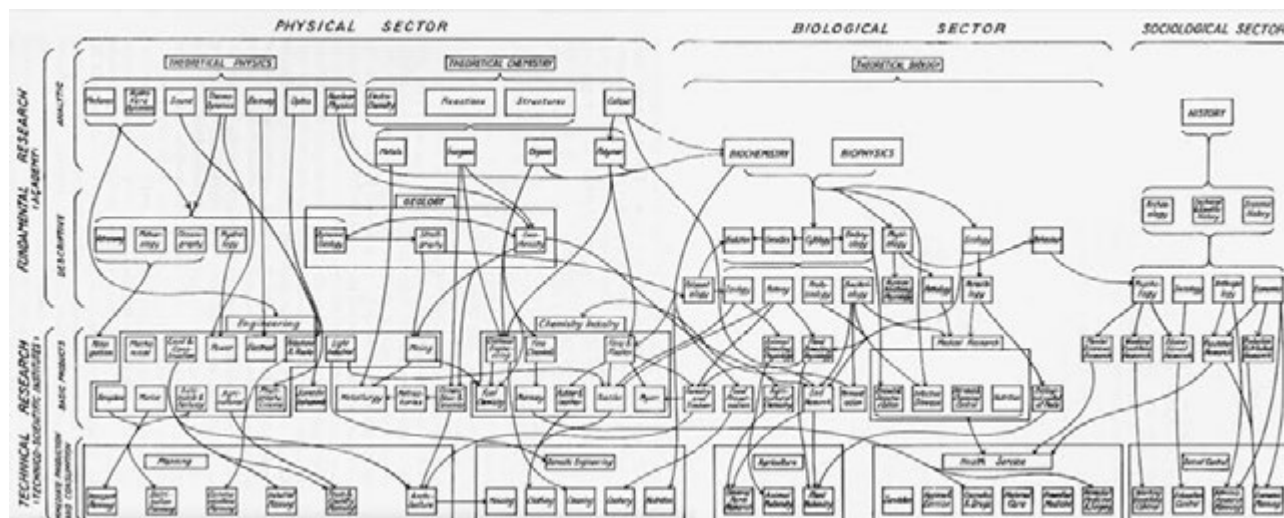


Figura 2 – Diagrama das Ciências de John Desmond Bernal

por exemplo, reflecte SS, DI e EM e, pelo contrário, a Cosmologia, a Astronomia, a Ciência planetária, a Geologia, a Oceanografia, a Meteorologia e a Eco-Ciência traduzem-se exclusivamente por G.

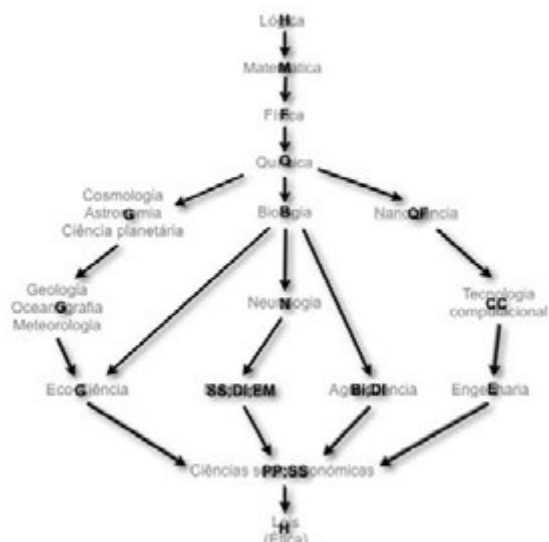


Figura 4 – Diagrama das Ciências de Balaban e Klein, de acordo com a codificação de Klavans e Boyack

De uma forma simplificada, o melhor mapa de consenso da estrutura básica da ciência a que Richard Klavans e Kevin W. Boyack chegaram pode descrever-se de uma forma circular, não cêntrica, como se mostra na Figura 5. A Matemática foi arbitrariamente colocada no topo e, a partir dela, as áreas científicas convencionais correlacionadas dispostas como se num mostrador de relógio. Para o interior deste círculo surgem áreas de maior interdisciplinaridade. A percentagem traduzida pela espessura do traço – *uma ligação de consenso* que é necessariamente uma ligação importante – refere-se à ocorrência na totalidade dos mapas examinados. O número de ligações que partem de uma área indica, *grosso modo*, o grau de influência dessa mesma área na ciência em geral, que será tanto maior quanto mais densa for a ligação de consenso; não deve, porém, permitir em qualquer circunstância, implicar que uma dada área é superior a outra.



Figura 5 – Mapa de Consenso de Klavans e Boyack

Mas, afinal, para que serve um mapa de ciência? Para começar serve para visualizar aquilo que, de algum modo, já parcialmente conhecemos ou intuímos – as relações entre diferentes áreas da ciência – o que não é objectivo menor. Mas vai mais longe, uma vez que permite (i) uma

compreensão básica de como a ciência está organizada, (ii) identificar os nós fundamentais de interdisciplinaridade ou (iii) apontar orientações de investigação. A combinação e ligação de áreas científicas tem tido como resultado a criação de novas disciplinas, como sejam a bioinformática e as nanotecnologias. Sem ser radical, pode afirmar-se que as novas disciplinas (e as grandes descobertas) nascem nas zonas “em branco”, isto é, no interior da circunferência gerada no mapa circular pelas “velhas” disciplinas, e localizadas de modo a reflectirem a influência destas. É a “Torre das Influências Felizes” [9].

A importância da ciência na sociedade ganha uma evidência superior e fornece uma estrutura cognitiva para a discussão de questões de política científica, com a sua consequente utilidade a nível do ensino básico, secundário e mesmo superior.

E A QUÍMICA ONDE ESTÁ?

Se entendermos que uma torre, independentemente do seu formato – linear ou circular, cêntrica ou não-cêntrica – é um mito ascensional, então a Torre das Ciências existe, uma vez que os seus tijolos contam uma história de elevação do conhecimento humano. Não se confunda a linguagem, não se pretenda os céus, deseje-se sim uma investigação e uma educação que enriqueça e eleve a nossa vivência terrena, alicerçada num pensamento crítico, ético e objectivo dos factos e dos fenómenos. Na Torre das Ciências espraiam-se as ciências formais, diluem-se as margens das ciências físicas e das ciências da vida, abraçam-se laivos das ciências sociais, da filosofia e da história das ciências, geram-se ciências aplicadas... É um *puzzle* multidimensional intrincado, curioso, desafiador de disciplinas; mas, vertical; vertical, porque auto-corrector.

O conhecimento científico não é, ou não pode ser, uma Torre de Marfim, torre muitas vezes confundida com o mundo académico universitário [10]. Tem de haver um propósito real nas ciências: a construção de uma atmosfera propícia à difusão do conhecimento que elimine erros conceptuais graves e permita aos alunos, e ao público em geral, usufruir de um processo de educação com qualidade. Afinal, é à ciência que se deve a maior modificação das condições de vida humana nos últimos séculos. E a Química onde está?

O artigo de Alexandru Balaban e Douglas Klein onde é apresentado o diagrama da Figura 3 tem por título “Is chemistry *The Central Science*?”. A denotação nasce do livro de texto de Química de Theodore Brown e colaboradores [11], mas a designação emerge agora apoiada na interligação entre disciplinas científicas, na emergência e desenvolvimento de ciências interdisciplinares e nos requisitos exigidos pelos currículos de cursos universitários. Se observarmos o diagrama proposto por aqueles autores, podemos constatar a “centralidade” da Química, em termos da frondosa ramificação que ela introduz no tronco comum... Alexandru Balaban é engenheiro químico e os seus projectos de investigação desenvolvem-se no âmbito da Química Orgânica; por seu lado, Douglas Klein é professor de Ocea-



Figura 6 – Pormenor da capa do livro “Chemistry: The Central Science”, de Brown et al, 2012 [11]

anografia e as suas pesquisas debruçam-se pela Química e Física Teóricas. O facto de os dois cientistas estarem relacionados directamente com a Química terá, porventura, introduzido alguma subjectividade na análise.

Reportemo-nos agora ao Mapa de Consenso (Figura 5) proposto por Richard Klavans e Kevin Boyack, ambos cientistas computacionais dedicados à visualização. Das 16 áreas científicas propostas, é a Química que apresenta o mais elevado número de *ligações de consenso*, cinco, conjuntamente com a Engenharia, embora esta seja muito mais fraca; as Especialidades Médicas, a Bioquímica e a Física ostentam quatro. Note-se, ainda, que é na região que compreende a Química, a Química Física e a Física que se situa a maior rede de *influências* relativas.

É indiscutível a vantagem da utilização da cientometria. Os mapas de ciência constituem uma poderosa ferramenta de esquematização e de informação relacional inteligível. No entanto, a informação utilizada na sua concepção – a escolha dos indicadores bibliométricos e da metodologia adoptada, aliada à subjectividade do planeador – podem conduzir a resultados dissemelhantes. A posição e ligações da Matemática, por exemplo, têm sofrido sério debate e as Ciências Biomédicas surgem, por vezes, como pólo preferencial de interacção [12-14].

A importância da Química vale por si mesma – nós somos Química e tudo o que nos rodeia Química é... mas não será demais enfatizar a relevância do seu conhecimento para o surgimento e desenvolvimento de muitas outras áreas científicas. É necessário expulsar os fantasmas da dificuldade e do desinteresse com que a Química, a par com a Matemática e a Física, se encontra actualmente envolvida. O afastamento da Química dos currículos científicos é, como se viu, contranatura. A educação desta ciência passa, indubitavelmente, pela aprendizagem de um conjunto robusto dos seus tópicos fundamentais com a correspondente actualização; mas não exclusivamente. Em paralelo, é indispensável ensinar a metodologia científica, alimentando um pensamento curioso, crítico, integrado... e alegre. A incorporação de problemas do quotidiano, a superação da dicotomia teoria-prática, a articulação com outros saberes ou a

apresentação “colorida” de *case studies* podem ser factores aliciantes num processo de aprendizagem [15,16].

Os cientistas que têm protagonizado as maiores descobertas têm encarado a ciência como uma forma de cultura integrada. Querem compreender mais. Querem compreender melhor. Continuam a edificar a Torre das Ciências.

REFERÊNCIAS

- [1] R. Verdenal, *A Filosofia Positiva de Auguste Comte*, in “A Filosofia e a História 1780-1880, História da Filosofia”, F. Châtelet (dir.), Publicações Dom Quixote, Lisboa, 1983
- [2] R. Gonçalves-Maia, “Ciência, Pós-Ciência, Metaciência”, 3.ª ed., Editora Livraria da Física, São Paulo, 2011
- [3] J.D. Bernal, “The Social Function of Science”, Routledge & Kegan Ltd, Londres, 1939
- [4] K. Börner, “Atlas of Science – Visualizing What We Know”, The MIT Press, Cambridge, 2010
- [5] A.T. Balaban, D.J. Klein, *Scientometrics* **69** (2006) 615-637
- [6] R. Klavans, K.W. Boyack, *JASIST* **60** (2009) 455-476
- [7] A ideia de “consenso” como condição necessária para a acumulação de conhecimento, mesmo nas fronteiras da investigação, tinha sido defendida numa base sociológica por Stephen Cole [8].
- [8] S. Cole, *AJS* **89** (1983) 111- 139
- [9] A “Torre das Influências Felizes” ou Ling-Tai, diz a lenda, era o centro do paraíso terrestre na China e servia não só para observar os céus, mas também para deles receber influências positivas.
- [10] N. Baron, “Escape from the Ivory Tower: A Guide to Making Your Science Matter”, Island Press, Nova Iorque, 2010
- [11] T.E. Brown, H.E. LeMay Jr., B.E. Bursten, C.J. Murphy, P.M. Woodward, “Chemistry – The Central Science”, Prentice Hall, Boston, 1.ª ed., 1977; 12.ª ed., 2012
- [12] C. Reinhardt (ed.), “Chemical Sciences in the 20th Century – Bridging Boundaries”, Wiley-VCH, Weinheim, 2001
- [13] Scimago Group: F. Moya-Anegón, B. Vargas-Quesada, Z. Chinchilla-Rodríguez, E. Corera-Álvarez, F.J. Muñoz-Fernández, V. Herrero-Solana, *JASIST* **58** (2007) 2167-2179
- [14] I. Rafols, A.L. Porter, L. Leydesdorff, *JASIST* **61** (2010) 1871-1887
- [15] R. Gonçalves-Maia, *Revue* **6** (2006) 12-16
- [16] R.M. Hazen, J. Trefil, “Science Matters – Achieving Scientific Literacy”, Anchor Books, Nova Iorque, 2.ª ed. 2009

Faça-se sócio da SPQ, receba o Boletim QUÍMICA e tenha acesso:

Às últimas notícias do mundo da Química ■ A artigos de relevo sobre a Química ■ A entrevistas com membros ilustres da Química ■ A uma agenda dos mais importantes eventos sobre Química aqui e além fronteiras.

A QUÍMICA NA LITERATURA

Maria Helena Santana

Universidade de Coimbra - Centro de Literatura Portuguesa
mahesa@fl.uc.pt

O diálogo da cultura literária com as diversas ciências atravessa a História do Ocidente correlacionando-se com o tema do Progresso. Na época que se seguiu ao Iluminismo, essa relação torna-se fracturante, na medida em que o desenvolvimento da ciência experimental – nomeadamente a Química – rivaliza com o poder simbólico da cultura humanística. Através de dois romances portugueses da viragem do século XIX para o século XX, propõe-se uma breve reflexão acerca do nascimento da era tecnológica: embora celebrado como uma grande conquista da modernidade, o progresso tecno-industrial é sobretudo sentido como uma ameaça, quer aos valores tradicionais quer à “civilização” e à “natureza”.

No século XIX, sempre que os romancistas precisavam de representar um homem de ciência, uma das áreas preferidas costumava ser a Química. Os motivos parecem compreensíveis: não só a disciplina estava então num grande momento de expansão, mas sobretudo porque o estereótipo mais comum do cientista era o do homem de bata branca, isolado do mundo no seu laboratório, vergado sobre tubos de ensaio e substâncias misteriosas ao comum dos mortais. Sucedia também tornarem-se obcecados e perderem o contacto com a vida real. Assim acontece em *La Recherche de l'Absolu*, de Balzac (1834) onde o “sábio”, ainda uma espécie de alquimista, fica praticamente louco, na ânsia de produzir diamantes a partir da cristalização do carbono.

Reencontramos a mesma temática num romance português já mais tardio, do escritor Teixeira de Queirós [1], *A Grande Químera* (1919), cujo protagonista é também um químico. O cientista do nosso romance, Manuel de Sá, é jovem e moderno: estudou no estrangeiro, já usa um microscópio, lê as revistas internacionais da especialidade. Trabalha com o objectivo nobre de penetrar nos segredos da Natureza, e não com um sentido utilitário; por sorte dele, não precisa de trabalhar nem de publicar para subsistir: investiga por conta própria e por gosto, num laboratório privado, montado em sua casa (nesta época ainda era possível fazer ciência amadorística, fora do meio universitário ou empresarial).

Manuel tinha uma visão negativista da sociedade: via o mundo de longe, à luz das leis da Natureza, e descrevia da bondade humana. Mas acreditava no poder salvífico da ciência como a única forma de remissão da “barbárie original”; através dela poderia haver esperança de aumentar o bem-estar comum e de superar as iniquidades sociais:

“As ciências naturais traziam à terra maldita, o imaginado paraíso. O braço do obreiro já descansava à sombra das aplicações do calor e da electricidade. Só faltava que a química fabricasse o sustento diário dum homem, representado numa pastilha alimentar, como o desejou Berthelot, para haver felicidade completa sobre a terra. Depois disto, os grandes problemas do proletariado inquieto teriam a solução natural, e

a equiparação dos homens pelo nivelamento satisfatório das necessidades urgentes da vida, estaria realizada. Os químicos e os outros sábios substituiriam o Deus antigo e omnipotente, facultando à colectividade social, com mui pequeno esforço, tudo quanto ela precisava para ser ditosa.” (p. 63).

Absorvida pela ciência-redentora, a crença religiosa deixaria, portanto, de ter sentido. É este um dos sofismas que o livro pretende desmontar. A certa altura, o cientista trava-se de razões com um velho padre, que lhe faz um sermão contra o progresso material:

“Corrigir a obra de Deus! *Vanitas vanitatum, et omnia vanitas!* Máquinas para voar e outras para a navegação por baixo de água! Deus criou o ar para as aves e o mar para os peixes, morgado, di-lo claramente o *Genesis*. (...) Já mais que uma vez lho tenho dito, isso a que chamam progresso tem acarretado mais males do que bens. A felicidade humana consiste na boa prática dos mandamentos do Sinai, como os ensina a nossa religião. O progresso material seca as almas, tira-nos a consolação de sermos humildes.” (p. 182-7)

A história prossegue: Manuel de Sá está à beira de começar uma aventura prometeica: trata-se da descoberta de um novo tipo de dinamite (a “mongite”), que viria coroar de êxito a sua carreira. O sacerdote, como seria de esperar, reage mal ao grande invento: “Mas, senhor morgado (...) não seria preferível inventar coisa que edifique, em vez de se propor a destruir o que está criado?” Manuel ouviu-o com respeito, mas mantém-se confiante no advento de uma nova era cerebral: “Destruímos, caro amigo, para edificar mais perfeito. Toda a ciência é construtiva”. Considera, além disso, que a ciência equipara os homens, é democrática e “não pede certidão de baptismo ao talento”.

O cientista tinha, porém, ideias confusas em matéria de “moral política”, e criara simpatia pelo movimento anarquista; recebe então a visita de dois operários militantes que lhe pedem colaboração para uma acção revolucionária. Confrontado com a utilização política, destruidora, do explosivo, a sua consciência moral começa a despertar:

“Não é para aniquilar o trabalho do homem, e o próprio homem, que a ciência conquistou à terra forças que nela existem mortas. Os explosivos devem ter um emprego harmónico com a justiça social, ajudando o nosso braço e não destruindo-o. Há tanta obra de paz a empreender, e aí é que os devemos aproveitar, com o fim de substituir a picareta, o martelo e toda a pena corpórea” (p. 89-90).

A arrogância científica recebe o golpe final com a explosão do laboratório. O desastre, provocado por incúria de um ajudante, deixa um rasto de mutilação e morte. E a lição filosófica a retirar da catástrofe é de alienação e de culpa. Manuel descobre então que a felicidade não se encontra na fama, mas nas coisas simples da vida: o estudo honesto, o amor da família, a paz campestre. Fica assim patente, com esta alegoria, o medo que a sociedade, bastante conservadora, começa a ter do poder da ciência aplicada, da sua capacidade infinita de transformar o mundo e os modos de vida ancestrais.

São muitos os escritores do século XIX a pensarem deste modo. Em geral escrevem romances muito pessimistas, em que se questiona o valor e a utilidade da ciência, a cultura materialista e o espaço possível da felicidade [2]. Inspiravam-se no pensamento de Ruskin, Schopenhauer e Tolstói – alguns dos autores que mais contribuíram para exprimir o desencanto civilizacional do fim-de-século. Todos eles condenam a cultura iluminista, considerando que o racionalismo instaurado a partir do século XVIII interrompeu toda uma orientação cultural fundada no “espírito”. Em última instância, seria o “demónio de Sócrates” do Ocidente (i.e., a orientação científica), o responsável pelo desvio histórico, anti-espiritual, da nossa civilização.

Compreende-se que o balanço crítico, vindo de homens de letras, seja predominantemente negativo. O triunfo da civilização tecnológica associa-se à crise do paradigma cultural de matriz filosófica e humanística que caracterizou a tradição ocidental no seu conjunto. A submersão da cultura pela técnica começa então a ser pressentida com algum dramatismo, sentimento que se acentuará no século XX. Na rejeição do materialismo – sinónimo desqualificador do progresso – é já bem visível o receio de uma modernidade entregue à sua dinâmica de entropia, onde os valores espirituais pouco ou nada significam. Como bem sintetiza Gianni Vattimo,

“A técnica aparece como a causa de um processo geral de desumanização que compreende quer o obscurecimento dos ideais humanistas da cultura, a favor de uma formação do homem centrada na ciência e na habilidade produtiva racionalmente dirigida, quer, no plano da organização social e política, um processo de acentuada racionalização que deixa entrever os traços da sociedade da organização total descrita e criticada por Adorno”. [3]

Esta é aliás uma antinomia recorrente. Desde o Iluminismo, o conceito de progresso foi objecto de sucessivas projecções de euforia e demonização. Observa Robert Nisbet, num estudo clássico sobre o tema [4], que duas tendências

se cruzam dialecticamente na história do pensamento ocidental: de um lado a convicção (dominante) que correlaciona o progresso com um aperfeiçoamento cumulativo do saber; do outro a ideia de que a evolução, a existir, assenta em critérios não-objectivos, como seja o aperfeiçoamento moral ou espiritual da natureza humana. Para esta linha de pensamento, o conhecimento e a própria civilização tendem a ser encarados negativamente.

O fosso começa a acentuar-se no Iluminismo e torna-se evidente no século XIX: em 1829, já Thomas Carlyle caracterizava o seu tempo como a “era mecânica”, que viera substituir a “era filosófica e moral”; e lembrava que a nossa felicidade depende sobretudo da nossa mente, e não das circunstâncias que estão fora de nós [5]. A ciência oitocentista encarregar-se-ia em breve de o desmentir: como sabemos, o darwinismo desacreditou a teologia criacionista e pôs em causa a imagem do Universo centrada no Homem.

Já o positivismo, herdeiro das Luzes, empenhou-se em valorizar o progresso científico, enquadrando-o numa visão optimista do mundo, de base racional: a fé no desenvolvimento científico, em que assenta a ‘filosofia’ positiva, supunha uma evolução paralela da organização social, orientada para o bem-estar dos cidadãos. O homem perdia um certo sentido de harmonia com o mundo, mas em contrapartida tornava-se agente do seu destino colectivo, sujeito da História.



Ilustração do livro de Louis Figuier *Les Merveilles de l'Industrie* (4 vols., 1873-1877)

Todavia, na era da Revolução Industrial, a ideia de progresso científico não se define apenas por belas abstracções especulativas. A tecnologia constitui doravante a sua manifestação mais evidente: por maior que seja a importância cognoscitiva do método experimental, das leis da hereditariedade ou do transformismo, dificilmente os conceitos teóricos podem competir com a realidade visível da máquina, da luz eléctrica, da telegrafia sem fios – para apenas mencionar alguns dos inventos mais emblemáticos do século [6]. A imprensa, rendida, divulga as maravilhas da mecanização, e as exposições industriais, em toda a Europa, celebram o seu triunfo. Nascia uma confiança, muitas

vezes desmesurada, nos instrumentos de aperfeiçoamento e domínio da Natureza; esperava-se a libertação do trabalho e o incremento da riqueza e do conforto.

Por outro lado, crescia o receio de que a indústria, cada vez mais dirigida para os interesses mercantilistas, desviasse a ciência do seu destino primordial. Nas últimas décadas do século, com o desenvolvimento do capitalismo industrial, esta perspectiva tinha forçosamente que considerar-se. A técnica, entregue à sua própria dinâmica, ameaçava escapar ao controlo de qualquer poder exterior. A função reguladora, que as então recentes ciências sociais chamaram a si, cedo começou a revelar-se inoperante. Vemos então os ideólogos, passada a euforia positivista, alertar para as dimensões incontroláveis do desenvolvimento, quer no plano social (os problemas decorrentes da proletarianização), quer no plano ético, como seja a distribuição da riqueza e o uso indiscriminado dos recursos naturais. Assim o seu discurso assume não raro uma tonalidade catastrofista: em lugar da realização da felicidade colectiva, o progresso geraria a anarquia e a perda da identidade humana e cultural.

Nas literaturas europeias surgem, a partir do século XIX, imagens futuristas de um mundo ultra-mecanizado, mas sob a ameaça do caos ou da desumanização [7]. Nada que nos surpreenda: ainda hoje a ficção científica denuncia essencialmente a fascinação e o medo dos demónios que a Ciência liberta. Em Portugal este tipo de literatura não tem grande tradição, mas Eça deixou-nos um humorístico exemplo no seu último romance, *A Cidade e as Serras*, onde descreve o absurdo existencial de um homem moderno, rodeado pelas últimas maravilhas da tecnologia do seu tempo; como sabemos, acabará por se refugiar, enfasiado, na sua velha quinta duriense, livre das amarras da “civilização”.

Cabe a este propósito mencionar um outro romance de Teixeira de Queirós – *O Famoso Galvão*, de 1898 [8] –, em que um *self made man*, imigrante português nas Américas, decide criar uma grande companhia de fomento (uma empresa de base tecnológica, como hoje se diria). Para isso recorre aos conhecimentos de um sábio alemão, de grande inteligência mas algo exótico (na representação ficcional, os sábios do século XIX tendem a ser alemães, e normalmente são alvo de troça). Trata-se, mais uma vez, de um especialista em química (industrial), que fica encarregado de produzir extraordinárias patentes: entre os novos inventos destacam-se uma linha de produção de cortiça e outra de ovos artificiais, e um “elixir de temperatura normal”, a distribuir em pastilhas, que funcionaria como um condicionador corporal. Todos estes inventos pareceriam risíveis, embora decerto alimentassem as fantasias científicas da época.

Mais tarde os dois amigos voltam a encontrar-se na América: o sábio ocupava-se agora de um novo processo de síntese do açúcar e de um acumulador eléctrico para aproveitamento da força das marés. E acabam por fundar uma fábrica de manteigas transformadas, extraídas de gordura mineral.

A ideia de substituir a Natureza por produtos sintéticos causa estranheza, mas é a ânsia de riqueza que destrói o

sonho: a grande Companhia de Fomento não vinga, porque o dinheiro dos accionistas é desencaminhado; e a fábrica americana vai à falência porque uma paixão infeliz desconcentra o aventureiro dos negócios. O romance pretende criticar os perigos do dinheiro no sistema capitalista nascente, mas a moral da história bem podia ser outra, de natureza psicológica: o “empreendedorismo” dá-se mal com o temperamento português.

Ganha assim expressão, no discurso ideológico e literário do fim-de-século, uma corrente antiprogressista que muitas vezes se classifica de reaccionária; com alguma razão, na medida em que entra em ruptura com a realidade do seu tempo. Como sabemos, trata-se em parte de um fenómeno cíclico, embora dramatizado em circunstâncias histórico-culturais concretas. Já antes acontecera com reacção romântica às Luzes, e voltará a verificar-se repetidamente, até aos movimentos ecologistas e “new age” dos nossos dias. À sociedade mecânica e utilitária opõe-se então a reconversão aos valores do espírito, tendo por vezes como corolário o retorno a um estado civilizacional anterior, pré-moderno e pré-científico. O ideal da paz campestre apresenta-se frequentemente como alternativa – uma alternativa igualmente mitificante e utópica, já se vê. O relógio do progresso nunca anda para trás.

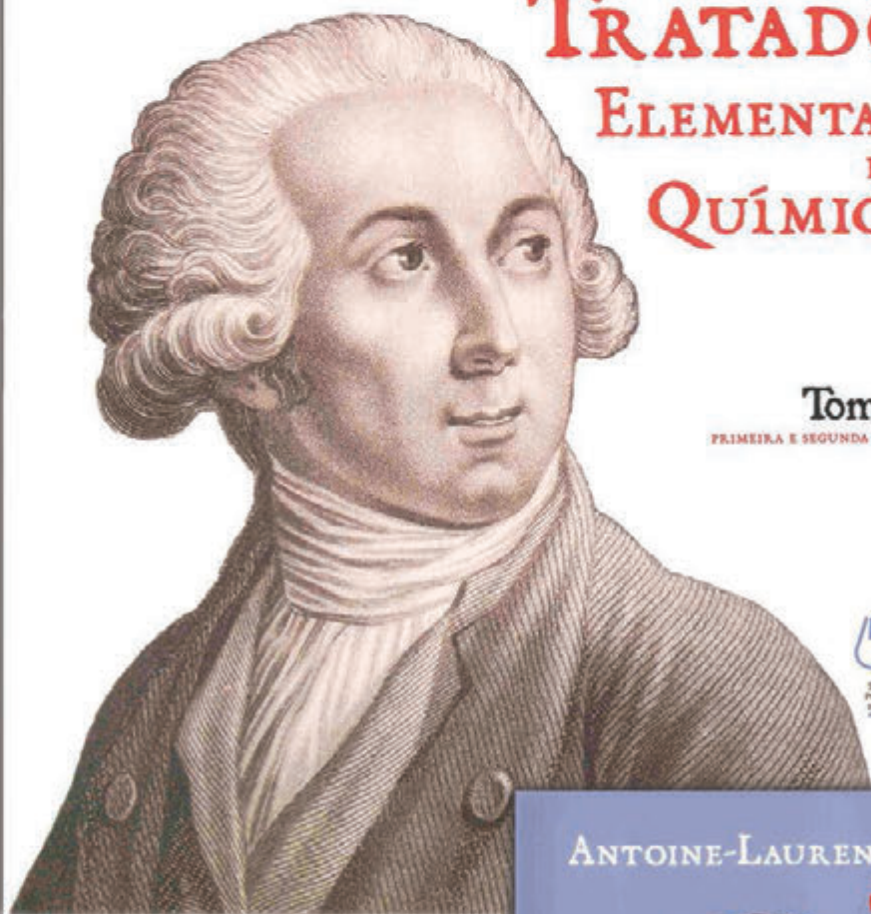
O presente texto foi apresentado por ocasião da jubilação do Prof. Sebastião Formosinho, em 20 de Setembro de 2013. Agradeço o convite ao Sr. Director do Departamento de Química da Universidade de Coimbra.

REFERÊNCIAS

- [1] Francisco Teixeira de Queirós (pseudónimo Bento Moreno) é autor de um ciclo de romances, “Comédia Burguesa”, alguns dos quais de tema científico: *O Famoso Galvão* (1898), *A Caridade em Lisboa* (1901) e *A Grande Quimera* (Lisboa, Parceria A. M. Pereira, 1919).
- [2] Para uma visão mais abrangente do tema cf. M. H. Santana, *Literatura e Ciência na Ficção do Século XIX*. Lisboa, INCM, 2007, cap. VI.
- [3] G. Vattimo, “A crise do humanismo”, in *O Fim da Modernidade* (trad.), Lisboa, Presença, 1987, p. 32.
- [4] R. Nisbet, *History of the Idea of Progress*, London, Basic Books, 1980, cap. I.
- [5] T. Carlyle, *Signs of the Times*, in *Selected Writings*, Penguin Books, 1971, pp. 64 e 71.
- [6] Cf. A. M. Baptista, *A Primeira Idade da Ciência. A Ciência no Século XIX e Tempo de D. Carlos I (1863-1908)*, Lisboa, Gradiva, 1996.
- [7] Cf. E. G. Ingersoll, *Representations of Science and Technology in British Literature since 1880*, London, Peter Lang, 1994; J. Noirai, *Le Romancier et la Machine. L’Image de la Machine dans le Roman Français (1850-1900)*, Paris, José Corti, 1981.
- [8] F. T. Queirós, *O Famoso Galvão*, Lisboa, Livr. Editora Tavares, Cardoso & Irmão, 1898.

ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

TRATADO
ELEMENTAR
DE
QUÍMICA



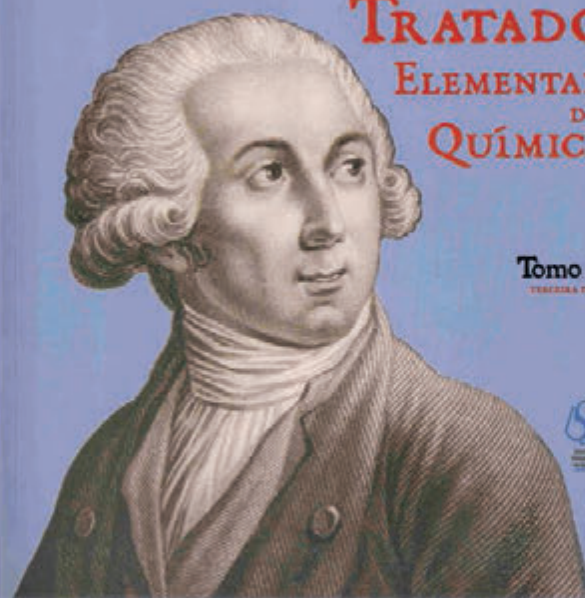
Tomo I

PRIMEIRA E SEGUNDA PARTES



ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

TRATADO
ELEMENTAR
DE
QUÍMICA



Tomo II

TERCEIRA PARTE



O «Tratado Elementar de Química» de Antoine-Laurent Lavoisier (1743-1794), publicado em Paris em 1789, é um dos grandes clássicos da Química. Escrito na nova nomenclatura proposta também por Lavoisier, em conjunto com Morveau, Berthollet e Fourcroy, é a primeira obra de química moderna, abandonando-se as inadequadas designações de raízes alquímicas e a desacreditada teoria do flogisto. No tratado, ilustrado pela mulher do autor, Marie-Anne-Pierrette Paulze Lavoisier, formula-se de forma clara a conservação da matéria e define-se elemento químico de forma operacional.

No centenário da fundação da Sociedade Portuguesa de Química, publica-se finalmente uma cuidada tradução portuguesa do «Traité», modernizada e anotada.

TOMO I e II

P.V.P.: 32 euros

Sócios da SPQ: 20 euros

ENCOMENDAS À SPQ

Av. da República 45, 3º esq - 1050-187 Lisboa

Telefone: 21 793 46 37

email: sede@spq.pt

SINGULARIDADES QUÍMICO-FARMACÊUTICAS DA FICÇÃO QUEIROSIANA (2ª PARTE)

João Manuel Costa¹, João Paulo André^{2*}

¹ Escola Secundária de Santa Comba Dão

² Departamento/Centro de Química, Universidade do Minho, Braga
jandre@quimica.uminho.pt

Da análise efectuada à presença e ao papel da Química e da Farmácia na escrita realista de Eça de Queirós, resultou uma primeira parte deste artigo, que inclui as secções “Águas minerais e antiácidos” e “Metais pesados”. Nesta segunda parte, apresentam-se as secções “Fármacos e preparações de origem vegetal”, “Óleos, solventes e produtos resinosos” e “Outros fármacos e produtos químicos”.

2.3. FÁRMACOS E PREPARAÇÕES DE ORIGEM VEGETAL

São vários os fármacos de origem vegetal ao longo da narrativa de Eça de Queirós. Começemos pelos alcalóides opiáceos encontrados n’ *Os Maias*: o xarope de codeína que Miss Sarah, por recomendação de Carlos, tinha de tomar “de três em três horas”, e o láudano que o próprio Carlos chega a equacionar tomar para se suicidar (“Assim escorregou ao pensamento da morte. Ela seria a perfeita cura, o asilo seguro. Porque não iria ao seu encontro? Alguns grãos de láudano nessa noite e penetrava na absoluta paz...”). O láudano é também referido n’ *O Primo Basílio*, a propósito de Jorge que “Foi reler todas as cartas que ela lhe escrevera para o Alentejo, procurando descobrir nas palavras sintomas de frieza, a data da traição! Tinha-lhe ódio então, voltavam-lhe ao cérebro ideias homicidas – esganá-la, dar-lhe clorofórmio, fazer-lhe beber láudano!”.

O láudano era uma tintura de ópio com uma formulação que remontava a 1760, da autoria do médico inglês Thomas Sydenham, e que para além do ópio incluía ainda canela, cravinho e açafão em vinho ou álcool etílico. Os médicos europeus recomendaram-no, pelo menos, até meados do século XIX [1].

O ópio, como se viu (1.ª parte), é referido duas vezes n’ *O Mistério da Estrada de Sintra* e uma vez n’ *O Mandarin* (“no pátio [...] só ficara um velho, bêbedo de ópio, caído a um canto como um fardo.”).

A codeína (Figura 10A) é um dos alcalóides principais do ópio (o látex seco obtido das cápsulas da papoila-dormideira, a *Papaver somniferum*), possuindo uma forte actividade anti-tússica. N’ *A Ilustre Casa de Ramires* encontra-se uma alusão sarcástica a um certo *xarope peitoral de James*: “Revelar Portugal, vulgarizar Portugal. Sim, amiguinho! Organizar, com estrondo, o reclamo de Portugal, de modo que todos o conheçam – ao menos como se conhece o Xarope Peitoral de James, hem? E que todos o adoptem - ao menos como se adoptou o sabão do Congo, hem?”. Trata-se de um xarope que, na época, era usado para a tosse e bronquites (repare-se no anúncio que uma antiga farmácia

de Lisboa fazia ao produto – Figura 11); deveria conter codeína e provavelmente seria o xarope de Miss Sarah.

A morfina (Figura 10B), outro alcalóide do ópio, possui intensa actividade analgésica, a qual pode ser acompanhada da sensação de euforia e de bem-estar passageiros; igualmente origina sonolência (*vide O Mandarin*) e cria dependência [2].

N’ *A Tragédia da Rua das Flores*, ao Marinho adoentado, o Carvalhosa recomenda: “E beladona, beladona!”. A beladona (*Atropa beladonna*) é uma herbácea existente em várias regiões do globo, incluindo Portugal, desde há muito conhecida pelos seus efeitos tóxicos. A toxicidade advém dos seus elevados teores em hiosciamina e escopolamina (Figura 10C). As moléculas destes dois alcalóides tropânicos exibem isomerismo óptico, sendo o isómero levo-rotatório (-) a forma biologicamente mais activa, ligando-se preferencialmente aos receptores de acetilcolina, inibindo a acção deste neuro-transmissor [3-5]. Podem, no entanto, ser usadas preparações galénicas das folhas da beladona, de forma a diminuir espasmos e cólicas gastrointestinais e biliares [2]. O medicamento actual *Buscopan*, um anti-espasmódico, é o derivado butilado da escopolamina [6]. N’ *O Primo Basílio*, o desmaio de Juliana (a criada de Luísa) – devido a uma síncope cardíaca, como explica Julião – é pouco duradouro: “mesmo antes que Joana atarantada, em cabelo, corresse à botica por um antiespasmódico, Juliana voltava a si, muito fraca.” O antiespasmódico seria, sem margem de dúvida, a beladona.

N’ *O Primo Basílio* podemos ainda encontrar outro alcalóide, o quinino que, conjuntamente com a *digitalis*, Juliana tomava para a insuficiência cardíaca: “Enfim, mesmo a engomar roupa se pode tomar *digitalis* ou quinino; mas é que o verdadeiro tratamento é o repouso, é a absoluta exclusão da fadiga. Que ela um dia se zangue ou que tenha uma manhã de cansada, e pode ir-se!”, alertava Julião.

O quinino propriamente dito é o sulfato de quinina, sendo esta (Figura 10D) um alcalóide anti-malárico isolado da casca da *Cinchona officinalis*, originalmente trazida

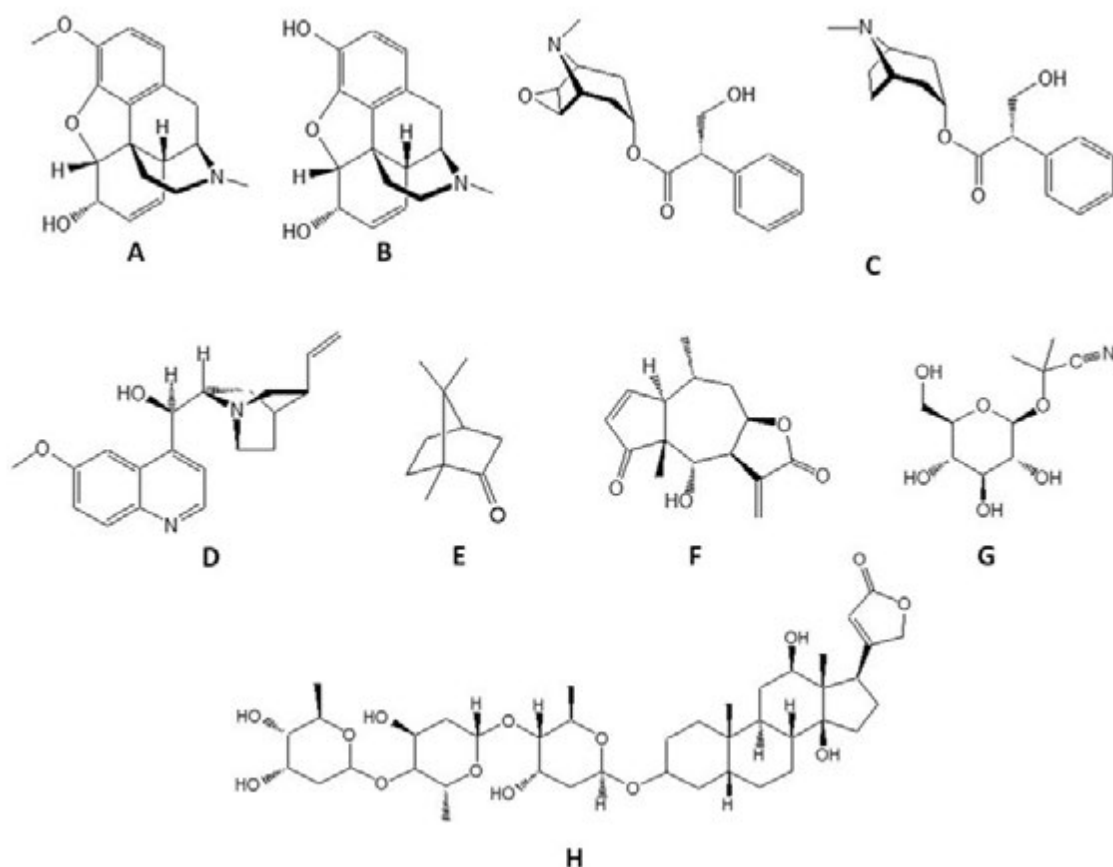


Figura 10 – Estruturas da codeína (A); morfina (B); escopolamina e hiosciamina (C); quinina (D); cânfora (E); helenalina (F), linamarina (G); digoxina (H)

da América do Sul para a Europa pelos navegadores espanhóis. Os farmacêuticos franceses Pelletier e Caventou isolaram e identificaram o alcalóide em 1820 [2].¹

O quinino não seria um fármaco adequado à condição clínica de Juliana, dado não ser de paludismo que sofria (“As feições miúdas, espremidas, tinham a amarelidão de tons baços das doenças do coração”).

Digitalis é o género a que pertencem mais de vinte espécies de dedaleiras, planta floral bem conhecida em Portugal. Só duas, no entanto, possuem interesse terapêutico, a *Digitalis purpurea* e a *Digitalis lanata*, devido aos vários glicosídeos cardiotônicos que contêm e que constituem um grupo de fármacos usados no tratamento de arritmia e insuficiência cardíacas; destes, a digoxina (Figura 10H) é um dos mais importantes [2]. Estes glicosídeos são fortes inibidores, e altamente específicos, da Na^+K^+ -ATPase. O uso terapêutico da *digitalis* não constituía uma novidade para a época em que *O Primo Basílio* foi publicado (1878) pois já tinha

sido demonstrado em 1785, pelo médico britânico William Withering, que as folhas da *Digitalis purpurea* possuem propriedades cardio-estimuladoras [7].

N’ *A Relíquia* encontramos duas alusões à arnica, uma herbácea da família das *Asteraceae* à qual também pertence o girassol. Várias espécies, como a *Arnica montana* e a *Arnica chamissonis*, contêm helenalina (Figura 10F), uma lactona sesquiterpénica com propriedades anti-inflamatórias que entra na composição de muitos preparados anti-inflamatórios de uso externo, destinados sobretudo ao tratamento de contusões e à cicatrização de ferimentos superficiais [8,9].

Um dos momentos mais hilariantes d’ *A Relíquia* ocorre quando Raposão, que espreitava uma donzela pelo bura-

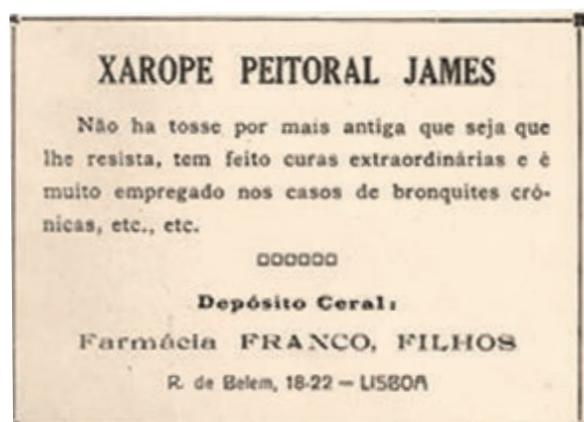


Figura 11 – Anúncio ao xarope peitoral de James

¹ O médico naval português Bernardino António Gomes (1768 – 1823) isolou a cinchonina, um outro alcalóide da casca da *Cinchona officinalis*. Este seu trabalho, publicado em 1812, teve algum impacto na comunidade científica internacional. Apesar de Pelletier e Caventou terem confirmado, posteriormente, que a recristalização da cinchonina pura realizada por Gomes constituía o isolamento do primeiro alcalóide puro, não deixaram de o criticar por não ter reconhecido a natureza básica deste composto. Gomes, todavia, verificou que a cinchonina pode ser dissolvida em ácido sulfúrico diluído e re-precipitada a partir desta solução pela adição de carbonato de potássio [http://www.spq.pt/docs/Biografias/BAGomesport.pdf].

ca da fechadura, é fortemente pontapeado pelo pai desta. O próprio Raposo descreve o que se passou a seguir: “É muito digno, coxeando, voltei ao quarto a fazer pacientes fricções de arnica. Assim eu passei a minha primeira noite em Sião.”. Anteriormente, já nos tinha informado que “ia prevenido com remédios para o caso de um contratempo intestinal nesses descampados bíblicos...”; “Até linhaça, até arnica!...”.

N’ *O Primo Basílio* é-nos dito que D. Felicidade “inundava-se de arnica”: “Tinha uma luxação simples; nos quartos da Silveira, com o pé em compressas de arnica, cheia de terror de perder a perna, passava o dia rodeada de amigas, chorando-se, saboreando os mexericos do recolhimento, e debicando petiscos.”. N’ *O Crime do Padre Amaro*, quando Amaro visitava o colega Natário, acamado com uma fractura, “enjoava-o o aspecto do quarto - impregnado dum cheiro de arnica e de suor, com uma profusão de trapos ensopados em malgas vidradas”. N’ *Os Maias*, o romance de Raquel Cohen com João da Ega termina com a sova que leva do marido, o mesmo que, de seguida, carinhosamente, lhe aplica arnica: “levava a sova, deitava-se depois com o marido, e ele mesmo, decerto arrependido, chamando-lhe nomes doces, a ajudava, em ceroulas, a fazer as aplicações de arnica! Aquilo acabava em arnica!”.

A linhaça que o Raposo levava na mala na viagem à Terra Santa, aparece também referida por diversas vezes nas lides farmacêuticas de Artur n’ *A Capital*. Linhaça é a designação dada às sementes do linho (*Linum usitatissimum*). Na composição das sementes existem mucilagens com poder laxativo e emoliente, e óleo com propriedades igualmente emolientes e dermatológicas. A farinha das sementes era aplicada sob a forma de cataplasma em furúnculos, abscessos ou adenites. Na linhaça existe ainda linamarina (Figura 10G), um glicosídeo cianogénico tóxico [2].

N’ *A Tragédia da Rua das Flores* é-nos dada a seguinte descrição do quarto em que o Marinho se encontrava adentado: “a mesa-de-cabeceira coberta de garrafas do médico, ... O quarto cheirava a cânfora...”. N’ *A Capital*, a convalescência do Sr. Abílio Pimenta, sob “ameaças de dores reumáticas”, foi “À custa de muito álcool canforado... - explicou ele com bonomia. - Foi a minha senhora que me curou. Nada de médicos, dizia-me ela. Tens dores nas cruzeiras? Fricções de álcool”. O odor a cânfora no Ramalhete desabitado é referido igualmente n’ *Os Maias*.

A cânfora é uma cetona terpénica (Figura 10E) existente na canforeira (*Laurus camphora*); é sólida à temperatura ambiente mas por sublimação liberta um forte aroma característico. Dissolvida em álcool etílico origina o *álcool canforado*, usado para inalações e fricções. A sua rápida evaporação sobre a pele deixa uma sensação de frescura, idêntica à do mentol [2].

N’ *O Crime do Padre Amaro*, encontra-se uma curiosa alusão a um produto que era utilizado na época para a produção de “vinho a martelo”. Tal acontece quando o Tio Osório, dono de uma casa de pasto em Leiria, diz que achava

Gustavo, amigo de João Eduardo, “mais magrito... Havia de ser das más águas de Lisboa e do muito *pau campeche* nos vinhos...”. A mesma alusão ao pau-campeche é encontrada nas *Crónicas de Londres*, quando Eça nos relata as movimentações militares da Rússia na Europa e na Ásia Menor. Não resistindo a abdicar da sua veia irónica, escreve: “Outros actos desagradáveis têm sido praticados no exército russo: assim o comissário-geral dos Fornecimentos acaba de ser fuzilado sem processo. Este funcionário estimável introduziu na farinha tal quantidade de cal – que realmente não era possível deixar de lhe meter algumas balas no peito. Uma certa quantidade de cal na farinha, como uma certa quantidade de *pau campeche* no vinho – são procedimentos razoáveis, que dão honra, grandes proveitos e ordinariamente uma condecoração. Mas uma tal porção de cal que torna a farinha mais própria para pintar paredes que para fazer pão é realmente abusivo, e o Conselho de Guerra foi apenas justo dando àquele funcionário uma disponibilidade... na eternidade.”

O pau-campeche (Figura 12) é a madeira da árvore *Haematoxylum campechianum*, nativa do México e da América Central, da qual se obtém um corante vermelho vivo, a hemeateína (Figura 13B), usado no passado em tinturaria, bem como na coloração de vinhos adulterados [10].



Figura 12 – Pau-campeche

Outro corante vegetal que aparece em Eça é a hena, ao descrever-nos, n’ *O Egipto - Notas de Viagem*, o bazar das drogas do Cairo: “Frutas secas, pastéis, drogas, tudo ali se reúne em confusão. As coisas estão em montes, em cima de papéis ou dentro de caixas sem tampa ou de sacos abertos; amontoa-se indiferentemente o *henné*, o antimónio, o pistache, o âmbar escuro², o *mastik*, a noz moscada, as tâmaras, a canela! Tudo aquilo é imundo!”.

A hena (*Lawsonia inermis*) é um arbusto muito comum no Norte de África, no Médio Oriente e na Índia. A sua casca

² O âmbar escuro a que Eça se refere deverá ser o âmbar cinzento, ou *ambergris*, um material que tem origem no cachalote. Estes animais produzem no tracto gastrointestinal um triterpeno, a ambreína, que uma vez excretado no mar, sofre uma série de reacções de degradação por exposição ao sal, ar e luz solar, que acabam por originar uma mistura complexa de várias substâncias, conhecida por *ambergris*, com odor agradável. É um material gorduroso que pode ser encontrado flutuando no mar, acabando por vezes por dar à costa em agregados que chegam a atingir 100 kg. Foi utilizado em perfumaria desde tempos remotos mas actualmente, para esse fim, recorre-se a substitutos de síntese [C. S. Sell (ed.), “The Chemistry of Fragrances – From Perfumer to Consumer”, RSC, Cambridge, 2006].

e as folhas secas são ricas em lawsona (Figura 13C), uma naftoquinona que em meio alcalino tem uma cor vermelho-alaranjada intensa. Para além de ser usada em cosmética, essencialmente para tingir o cabelo e para tatuagens da pele, a lawsona contém também propriedades antifúngicas que justificam a sua utilização em doenças dermatológicas [2].

Finalmente referimos a tília (*Tilia cordata*, *T. platyphyllus*, *T. vulgaris*), cuja inflorescência possui flavonóides com propriedades ansiolíticas e sedativas [2,11] e que, em Eça, aparece n' *O Crime do Padre Amaro* não só como elemento cenográfico (“uma fresca folhagem de tília que roçava o peitoril da janela”), como também através da alusão à respectiva infusão: “Um chá de tília alivia-o às vezes... Mas por desgraça hoje nem tília tenho! Ai, Jesus! Amaro correu a casa a buscar tília”, para logo de seguida D. Josefa agradecer: “Muito agradecida, senhor pároco, dizia D. Josefa. Rica tília! É de muita caridade. Ele agora naturalmente cai em sonolência.”.

2.4. ÓLEOS, SOLVENTES E PRODUTOS RESINOSOS

No conjunto da narrativa queirosiana, para além do azeite, sobressaem as referências a dois outros óleos: o de amêndoas doces e o de rícino. O óleo de amêndoas é obtido por prensagem das sementes maduras da amendoeira (*Prunus dulcis*), sendo constituído por uma variedade de ácidos gordos. Pode ser usado directamente nas inflamações da pele e como protector solar sendo, por isso, muito comum na indústria cosmética [2]. N' *O Primo Basílio*, Eça recorre a este óleo para o retrato físico de Joana, a cozinheira de Luísa e Jorge: “Era uma rapariga muito forte, com peitos

de ama, o cabelo como azeviche, todo lustroso do óleo de amêndoas doces”.

N' *O Primo Basílio* surge também o óleo de rícino; em forma de comparação, Leopoldina menciona-o a Luísa: “É como quem toma óleo de rícino! — disse a outra com um gesto cínico. E acrescentou, vendo o horror de Luísa: - Que diabo! Onde é que está a desonra, em pedir dinheiro emprestado? Todo o mundo pede...”. N' *O Conde d'Abranhos*, a alusão ao óleo de rícino é feita com o intuito de ridicularizar um membro do governo: “o Ministro das Obras Públicas, batendo-se em duelo, não vomitara, mas tivera um tão vergonhoso contratempo intestinal, que fora necessário conduzi-lo a uma venda próxima, onde, durante horas, o prostrado estadista circulou lividamente de um banco da cozinha para um recanto do pátio, como sob a influência dissolvente de óleo de rícino tomado sem discernimento!”. N' *A Cidade e as Serras*, este óleo é igualmente referido de forma metafórica: “Logo nessa manhã (com uma actividade em que eu reconheci a pressa enjoada de quem bebe óleo de rícino) escreveu ao Silvério mandando cair, assoalhar, envidraçar o casarão”.

O óleo de rícino é obtido a partir das sementes da *Ricinus communis*, uma planta das regiões tropicais e subtropicais [8]. É fundamentalmente constituído por ricinoleína (Figura 13A), o éster glicérico do ácido ricinoleico. O efeito purgativo do óleo de rícino é devido à acção irritante do ácido ricinoleico sobre a mucosa intestinal, sendo este produzido através da hidrólise enzimática da ricinoleína.

No que respeita a solventes, existe na ficção de Eça uma variedade considerável: álcool, clorofórmio, éter, benzina,

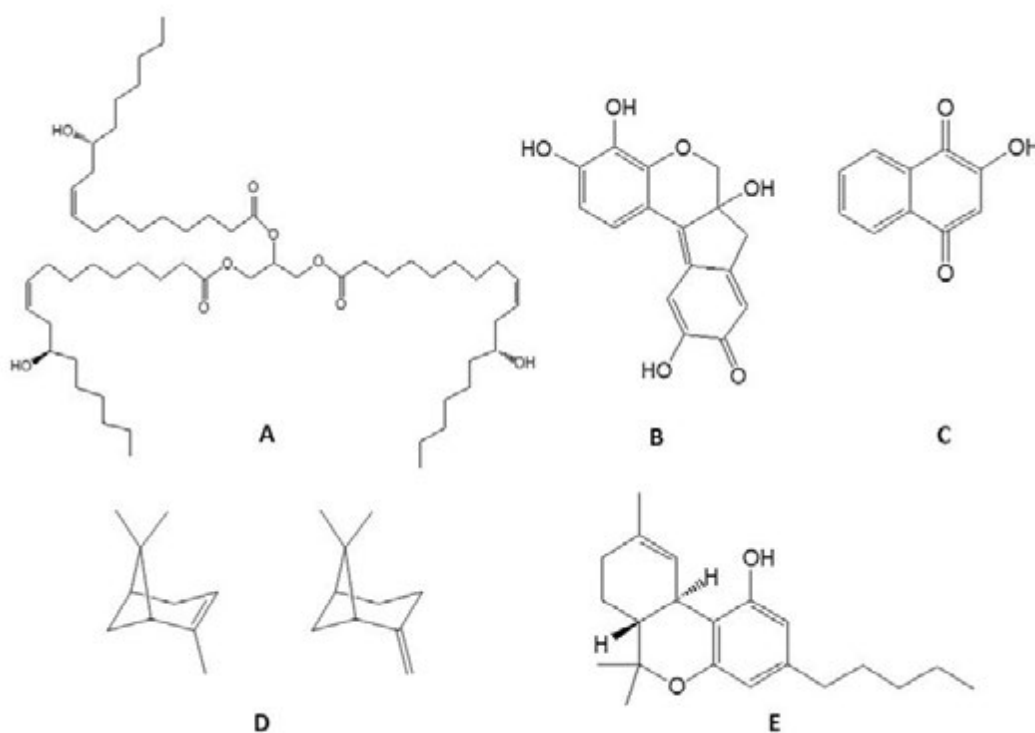


Figura 13 – Estruturas da ricinoleína (A); hemateína (B); lawsona (C); α - e β -pineno (D); Δ_9 -tetra-hidrocanabinol (E)

aguarrás, terebintina... O éter refere-se ao éter dietílico, solvente comum em Química Orgânica e utilizado como agente anti-séptico em hospitais. O éter dietílico foi, em 1842, o primeiro agente anestésico a que a medicina recorreu, afigurando-se, assim, algo duvidosa a escolha deste solvente n' *O Primo Basílio* para a reanimação de Luísa, após o desmaio provocado pela visão da carta de Basílio (“Felizmente havia éter, fizeram-lho respirar; apenas abriu lentamente os olhos, Jorge precipitou-se sobre ela”) [12].

Em *Civilização* e n' *A Cidade e as Serras*, Eça dá ao éter um destino menos comum: a gastronomia em casa de Jacinto. Assim, em *Civilização* encontramos: “A sua sopa de alcaçofra e ovas de carpa; os seus filetes de veado macerados em velho Madeira com puré de nozes; as suas amoras geladas em éter”. Por seu lado, n' *A Cidade e as Serras* aparece: “Depois saboreariam aqueles senhores um filete de veado, macerado em Xerez, com geleia de noz. E por sobremaça simplesmente laranjas geladas com éter” e ainda “morangos gelados em Champanhe e avivados dum fio de éter!”. Nestas passagens, como notou Marie-Hélène Piwnik [13], o éter possui um significado duplo (“prato simbólico”), contudo, como solvente, pode efectivamente arrefecer as frutas como consequência da sua grande volatilidade.

O clorofórmio é outro solvente comumente usado em Química Orgânica e que, apesar da sua toxicidade, que afecta sobretudo o fígado, foi também, a partir de 1848, utilizado como anestésico, uso esse que se estendeu até ao século XX [14]. N' *O Crime do Padre Amaro*, a propósito do estado clínico de Amélia, a engomadeira Dionísia afirma ao abade Ferrão que “Estava indignada. O senhor doutor tinha torturado a criaturinha. Até lhe quisera administrar clorofórmio...”. N' *O Primo Basílio*, como se viu, o traído Jorge, num assomo de ódio para com Luísa, pensou “esganá-la, dar-lhe clorofórmio, fazer-lhe beber láudano!”.

A benzina, também designada por éter de petróleo, é um solvente obtido da destilação do petróleo, e corresponde a uma mistura de vários hidrocarbonetos. Dado o seu elevado poder de dissolução de gorduras é, ainda hoje, usada para remover nódoas nas limpezas de roupa a seco. N' *O Conde d' Abranhos*, como vimos, a sua menção constitui um exercício da mais fina ironia: “Este governo não há-de cair – porque não é um edifício. Tem que sair com benzina – porque é uma nódoa!”.

Os produtos resinosos são exsudatos de secreções de plantas, endurecidos por exposição ao ar, e que apresentam uma composição química complexa da qual os compostos terpénicos (ácidos resínicos, álcoois resínicos, resinóis e outros) são os mais representativos. Praticamente todos os produtos resinosos contêm óleos essenciais, podendo alguns deles conter gomas (designando-se nesse caso gomo-resinas). Se o exsudato resinoso contiver ácido benzóico ou ácido cinâmico, ou ésteres destes, designa-se por bálsamo.

Na obra de Eça, são abundantes as referências a vários destes produtos resinosos e aos seus derivados. Começamos pela terebintina, um solvente obtido da destilação de

óleo-resinas provenientes de árvores como a *Pistacia terebinthus* ou o pinheiro-bravo e constituído por terpenos, dos quais se destacam o α - e o β -pineno (Figura 13D) [2]. Em termos médico-farmacêuticos, a terebintina foi utilizada desde tempos remotos, sobretudo para aplicação tópica, tanto para fricções como para combater parasitas do corpo; quando misturada com gordura animal podia constituir unguentos para o peito ou inaladores para problemas nasais e de garganta. Exibe propriedades ligeiramente anti-sépticas e expectorantes, tendo sido usada no tratamento da bronquite crónica. No passado, a sua ingestão chegou a ser recomendada para combater parasitas intestinais. Alguns preparados farmacêuticos modernos contêm ainda terebintina na sua formulação [8].

N' *Os Maias*, após o regresso de Carlos de Paris, é-nos assim descrito o *Ramalhete*: “No salão nobre os móveis de brocado, cor de musgo, estavam embrulhados em lençóis de algodão, como amortalhados, exalando um cheiro de múmia a terebintina e cânfora”. N' *A Cidade e as Serras* há também uma referência à terebintina a propósito de Jacinto que, apesar da sua vivência opulenta (ou devido a ela), acaba por soçobrar na mais profunda angústia: “Que maçada! E depois uma noite abominável, enrodilhada em sonhos... Tomei sulforal, chamei o Grilo para me esfregar com terebintina... Uma seca!”.

A aguarrás, também designada por essência de terebintina, é uma mistura líquida de vários compostos alifáticos, obtida através da destilação da terebintina, e constitui um bom solvente para tintas, ceras e vernizes. N' *Os Maias*, quando Eça se prepara para descrever os atributos físicos de Raquel Cohen, a amante, Carlos diz-lhe que não quer saber por Eça estar bêbedo, ao que este ironicamente retorquiu: “Bêbedo! Ele? Ora essa!... Era coisa que não podia, era empiteirar-se. Tinha feito o possível, bebido tudo, até aguarrás”.

Os bálsamos são amplamente mencionados por Eça, principalmente em sentido figurado, como por exemplo quando n' *O Crime do Padre Amaro* o secretário-geral em Leiria diz ao padre Natário: “No fim de tudo a fé é a mola real da sociedade. Tome uma chávena de chá... Ah! é um grande bálsamo!...”. Perante a recusa do chá acrescentou: “Mas não! Quando digo um grande bálsamo refiro-me à fé, não ao chá! Ah! ah! É boa, não?”. Em sentido *tout court* encontramos n' *O Suave Milagre* as seguintes passagens: “atravessando numa barca para a terra dos Gerassénios, onde começava a colheita do bálsamo” e “No Poço de Jacob repousava uma larga caravana, que conduzia para o Egipto mirra, especiarias e bálsamos de Gileade”. Este último excerto, curiosamente, estabelece uma forte intertextualidade com o *Génese* (37:25): “e eis que uma companhia de ismaelitas vinha de Gileade; e os seus camelos traziam especiarias e bálsamo e mirra, e iam levá-los ao Egipto.”.

O bálsamo de Gileade, produto gomo-resinoso também conhecido por bálsamo da Judeia ou bálsamo de Meca, é obtido da *Commiphora gileadensis* (*Commiphora opobalsamum*), planta nativa do sul da Arábia mas cultivada

nas terras de Israel desde a Antiguidade. No mundo greco-romano o seu perfume era altamente apreciado sendo também o que atingia os preços mais elevados. Seria este o bálsamo que a Bíblia várias vezes refere [15].

Em Eça, no domínio dos produtos resinosos, há ainda a destacar a mirra: “Porventura já algum grave rei do Oriente despertou, e olhou a estrela, e tomou a mirra nas suas mãos reais” (*A Cidade e as Serras*). N’ *A Relíquia* a mirra aparece em passagens como “daquela multidão saía um cheiro morno de suor e de mirra”, “Topsius ainda parou entre as tendas dos perfumistas, (...) mas logo fugimos ao ardente cheiro que ali sufocava, vindo das resinas, das gomas dos países dos negros, dos molhos de plumas de avestruz, da mirra de Oronte, das ceras de Cirenaica, dos óleos rosados de Císico (...)” e “O essénio entregou a um dos escravos a trouxa, e o cesto que estava cheio de mirra e de ervas aromáticas”.

N’ *O Mandarin* há uma referência a “uma caixa de frascos de «Opoponax»...”. O opoponax (ou opopanax) é obtido da seiva da *Opopanax chironium*, da família das *Apiaceae*, e a mirra provém da seiva de plantas do género *Commiphora*, pertencentes à família das *Burseraceae*. São ambos ricos em polissacarídeos e proteínas, bem como numa variedade de óleos essenciais voláteis que lhes conferem a sua fragância particular, de acordo com a paleta de esteróides, esteróis e terpenos que apresentam. Por exemplo, a combustão do opoponax origina a libertação de um odor característico que faz lembrar o da alfazema [16]. Ao longo dos tempos estas gomo-resinas têm sido usadas como agentes perfumadores, tanto na forma de incensos (Figura 14) como de perfumes corporais, embora tenham também sido utilizadas para fins medicinais. Desde a Antiguidade que a mirra é um constituinte de incensos, embora o incenso propriamente dito seja o óleo-gomo-resina (contém teores mais elevados do óleo essencial) obtido de plantas como a *Boswellia carterii*, igualmente uma *Burseraceae* [17]. Estes produtos resinosos são actualmente usados em pastas dentífricas e na indústria da perfumaria. A mirra, devido às suas propriedades antibacterianas e antifúngicas, está ainda inscrita na Farmacopeia Portuguesa [2].



Figura 14 – Opoponax e vela aromática actual

As referências ao incenso são comuns na obra de Eça, sendo *O Crime do Padre Amaro*, por motivos óbvios, especialmente abundante nelas: “ramos bentos, palmas de mártires, cartuchinhos de incenso”; “o ar adensava-se já dos hálitos juntos e de um cheiro de incenso”; “Depois ele mesmo, de pé, no segundo degrau do altar, de mãos postas, foi incensado; o Pimenta vesgo fazia ranger galhardamente

as correntes de prata do turíbulo; um perfume de incenso derramava-se, como uma anunciação celeste”; “recebendo o cheiro que ela trazia da igreja nos vestidos, impregnados de incenso e salpicados de água benta”; “toda a casa cheirava a cera e a incenso”.

N’ *A Relíquia*, encontramos a inesquecível descrição de como o Raposão iludia a sua devota tia: “Por isso agora as minhas precauções eram tão apuradas que, para evitar me ficasse na roupa ou na pele o delicioso cheiro da Adélia, eu trazia na algibeira bocados soltos de incenso. Antes de galgar a triste escadaria da casa, penetrava subtilmente na cavaliariça deserta, ao fundo do pátio; queimava no tampo de uma barrica vazia um pedaço da devota resina; e ali me demorava, expondo ao aroma purificador as abas do jaquetão e as minhas barbas viris... Depois subia; e tinha a satisfação de ver logo a Titi farejar, regalada: - Jesus, que rico cheirinho a igreja!”. Nesta obra, podem ainda encontrar-se outras alusões a este produto associado ao divino, à evasão e ao misticismo: “os regalos de um altar, o incenso vivo das rosas” e “Queimai incensos e nardos”.

N’ *A Ilustre Casa de Ramires*, de forma metafórica, encontramos a seguinte referência ao incenso: “E de entre as suas ameias, mais alto que da varanda, lhe parecia interessante respirar aquela rumorosa simpatia esparsa, que em torno, pelas freguesias rolava, subindo para ele, através da noite, como um incenso.”. N’ *Os Maias* pode também ler-se: “E Ega acendeu um pouco de incenso em dois perfumadores de bronze.”; “Pouco a pouco, o calor, o aroma do incenso, a exalação das flores, forçaram o Baptista a abrir uma das janelas do terraço.”; “Ega, depois de beber um gole de café, voltara ao escritório, onde o cheiro de incenso espalhava uma melancolia de capela.” e “Ainda errava um vago cheiro de incenso e de fenol.”. N’ *O Primo Basílio*, o incenso é igualmente mencionado: “recamado de ouro, entre instrumentações solenes e rolos de incenso!”, “sonhava com os incensos e os almíscars³ das florestas aromáticas” e “as asas do nariz dilatavam-se-lhe, como para respirar os incensos”. No conto *A Perfeição*, pode da mesma forma ler-se: “esta deserta imensidade do mar salgado em que se não encontram cidades de homens, nem templos cercados de bosques, nem sequer um pequenino santuário de onde suba o aroma do incenso”.

³ O almíscar é um perfume de odor quente e intenso, extraído de uma glândula anal de animais como o cervo-almíscarado mas que também pode ser encontrado nalgumas espécies vegetais. O cheiro do almíscar animal deve-se ao indol e escatol (pouco agradáveis), a que se adicionam ainda a muscona e a civetona, conferindo-lhe o seu perfume característico, de notas doces e quentes. Tem sido usado na perfumaria desde tempos remotos mas actualmente é obtido por via sintética [C. S. Sell (ed.), “The Chemistry of Fragrances – From Perfumer to Consumer”, RSC, Cambridge, 2006]. Eça também menciona o almíscar n’ *A Relíquia*: “uma senhora, grande e branca, com um rumor forte de sedas claras, espalhando um aroma de almíscar” e “Mas tranquilizado, decerto, pela minha face jucunda e material, pelas minhas luvas almíscaradas, pelo meu fútil raminho de violetas”. Aparece igualmente no conto *Adão e Eva no Paraíso*: “preguiçam pedregosos crocodilos, achatados sobre o ventre, que arfam molemente, escancarando as fundas goelas na tépida preguiça da tarde, embebendo todo o ar com um cheirinho de almíscar.”.

O mástique, que faz parte do rol de produtos disponíveis no bazar das drogas do Cairo, tal como nos é relatado n' *O Egipto – Notas de Viagem*, é uma gomo-resina de cor branca amarelada e semi-transparente (Figura 15), obtida da seiva da *Pistacia lentiscus*, árvore que é cultivada sobretudo na ilha grega de Quios. É utilizado em vernizes e como material de vedação em carpintaria. O seu sabor fresco a pinho e a cedro é muito apreciado nas doçarias da Grécia e da Turquia, em particular em gelados. Tem propriedades medicinais, nomeadamente no alívio dos sintomas de úlceras gástricas e duodenais [18].



Figura 15 – Mástique

Ainda n' *O Egipto - Notas de Viagem*, há uma curiosa referência ao haxixe: “Fomos uma única vez ao bazar das drogas: procurávamos *hachisch*. - *Hachisch?* – disse-nos Jonas Alli. – Mas é proibido! - Mas deve-o haver... sobretudo sendo proibido! - Em primeiro lugar – responde ele gravemente -, há três qualidades de *hachisch*: há *hachisch* em pastilhas... - Pois venham as pastilhas! - Há *hachisch* em bolo... - Pois venham os bolos! - Há *hachisch* em geleia... - Então, venha a geleia!.”

O haxixe (do árabe “hashish”) é o exsudato resinoso obtido a partir das brácteas (pequenas folhas) e das bractéolas das inflorescências do cânhamo-indiano e de outras variedades de *Cannabis* (caso da *Cannabis sativa*). São plantas ricas em canabinóides, sendo o Δ_9 -tetra-hidrocanabinol o constituinte mais psicoactivo (Figura 13E). As partes que são fumadas (folhas e flores), numa preparação idêntica à do tabaco, são geralmente designadas por marijuana ou liamba. O Δ_9 -tetra-hidrocanabinol tem acção analgésica e antiemética, sendo também usado como medicamento anti-glaucoma [19, 20].

N' *A Cidade e as Serras* há referência ao âmbar: “Desde o berço, onde a avó espalhava funcho e âmbar para afugentar a Sorte-Ruim (...)” e “Ah! O âmbar e o funcho da Sr^a. D. Angelina tinham escorraçado do seu destino, bem triunfalmente e para sempre, a Sorte-Ruim!”. O âmbar é resina fossilizada e segundo as crenças populares tem o poder de atrair boa sorte, sendo por isso usado como amuleto. N' *A Relíquia* encontramos a seguinte descrição: “e os tecidos bordados, os algodões de Galácia, os finos linhos de cores que as cingiam, ensopados nas essências ardentes de âmbar, de malobatro e de bácaris, enchem o ar de fragrância e de moleza a alma dos homens”. O malóbatro era um óleo

aromático citado desde a Antiguidade e a partir do qual se preparavam unguentos; crê-se poder ter sido obtido da *Cinnamomum tamala*, uma *Laureaceae*. O bácaris (*Baccharis dracunculifolia*) é um arbusto da família das *Asteraceae*, nativo da América do Sul e rico em óleos essenciais e ácido cafeico, a que são atribuídas propriedades antioxidantes e anti-inflamatórias [21,22].

2.5. OUTROS FÁRMACOS E PRODUTOS QUÍMICOS

O caso do “sulforal”, que Jacinto toma para a insónia n' *A Cidade e as Serras* (“Tomei sulforal, chamei o Grilo para me esfregar com terebintina...”), é merecedor de alguma atenção. Com efeito, foi “sulforal” que saiu na primeira edição do romance, todavia existem algumas edições posteriores em que a designação do fármaco consta, correctamente, como “sulfonal”. O *Sulfonal* (Figura 16) foi efectivamente um fármaco que, pelas suas propriedades hipnóticas, foi adoptado em 1888 como indutor do sono [23].

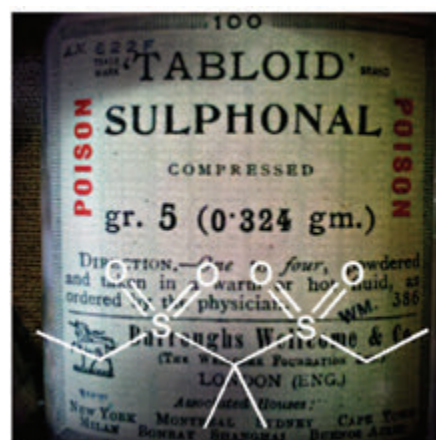


Figura 16 – Sulfonal

Por sua vez, o *Sulforal* é um antibiótico actual, de aplicação veterinária, que obviamente não existia no tempo de Eça (trata-se de uma sulfonamida, categoria de compostos que só apareceu a partir de 1932 [24]). Admite-se, assim, que Eça transcreveu mal a designação do fármaco, o que não deixa de ser compreensível, dada a similaridade fonológica de “sulforal” com “sulfuroso” e “sulfúrico”.

Os cheiros que, n' *Os Maias*, Eça atribui ao Ramalhete, são variados. Carlos notou o aroma da terebintina e da cânfora mas Eça, ao recordar com nostalgia as felicidades ali passadas, notou que no ar “Ainda errava um vago cheiro de incenso e de fenol.” O fenol (ácido carbólico) foi originalmente obtido em 1834 pelo alemão Friedlieb Ferdinand Runge, a partir da destilação do alcatrão da queima da hulha. Em 1867, o médico britânico Joseph Lister foi pioneiro na utilização do fenol como agente anti-séptico nos procedimentos cirúrgicos e no pós-operatório, reduzindo drasticamente as mortes por infecção. A hulha (carvão mineral) foi usada em Londres desde 1814 para obtenção do gás de iluminação pública, que era constituído essencialmente por hidrogénio, metano e monóxido de carbono [24]. Posteriormente, a “novidade” também acabaria por chegar a Portugal, sendo o gás de iluminação objecto de vastas referências na obra de Eça.

O nitrato de prata, outro produto químico patente na prosa queirosiana, é um sal que, sendo cáustico, era utilizado em Medicina como cauterizador para eliminação de verrugas e outras pequenas tumorções da pele e, por isso, também conhecido por “pedra infernal”. N’ *A Capital* é referido de forma metafórica: “como tratamento externo, cautério de nitrato de prata” e “Portugal não deve ser reformado, como diz o Damião, deve ser queimado a nitrato de prata!...”.

N’ *O Mistério da Estrada de Sintra*, após a enunciação de um rol de sintomas de fraqueza do narrador (“empalideceste”, “beijos brancos”, “vertigens”, “abuso de tabaco nas funções do coração”, “debilidade resultante da fome”, ...), encontramos: “Agora estás afogueado e vermelho como lacre: toma ferro e brometo.”. Com efeito, os brometos foram durante o séc. XIX usados como sedativos, em especial o brometo de potássio. No início do séc. XX usou-se, para o mesmo fim, o brometo de lítio, prática que foi abandonada na década de 40 devido ao considerável número de vítimas mortais que fatalmente o confundiam com o sal da cozinha. Os brometos, todavia, são ainda hoje usados em medicina veterinária. O ferro, por via oral, intramuscular ou endovenosa, é desde o séc. XIX utilizado para tratamento da anemia. A carência deste elemento químico pode provocar também distúrbios como anorexia, sensibilidade óssea, problemas digestivos, tontura (“vertigens” n’ *O Mistério da Estrada de Sintra*) e fadiga [25].

Os ácidos encontrados na obra de Eça são o oxálico e o prússico/cianídrico. Com uma dissolução do primeiro, limpava o sacerdote o seu candeeiro de latão n’ *O Conde d’Abranhos*. Com efeito, o ácido oxálico é um composto bastante venenoso mas que, entre outras aplicações, é usado como produto anti-tártaro e na limpeza de metais e na remoção de ferrugem. As suas funções devem-se ao elevado poder quelante do ião oxalato. A sua toxicidade deve-se, conseqüentemente, à enorme tendência para complexar o ião cálcio, podendo baixar a concentração fisiológica deste ião para níveis críticos [26]. O ácido prússico é altamente venenoso pois corresponde a uma solução aquosa de cianeto de hidrogénio. A toxicidade do ião cianeto é provocada pela sua ligação à citocromo *a-a₃* oxidase, inibindo a actividade enzimática desta. Como resultado, as células ficam privadas do uso de oxigénio e a produção de trifosfato de adenosina diminui drasticamente [5].

N’ *O Mistério da Estrada de Sintra* já tinha sido encontrada a referência ao vinho “destemperado com ácido prússico” e n’ *O Crime do Padre Amaro*, o Carlos da botica, num rancor “farmacêutico” contra os republicanos, que logo se transforma num rancor “legalista”, afirma-se da seguinte forma: “Eu sou um homem pacífico, aqui a Amparozinho conhece-me bem; pois se eu tivesse de aviar uma receita para um republicano declarado, não tinha dúvida, em lugar de lhe dar uma dessas composições benéficas que são o orgulho da nossa ciência, de lhe mandar uma dose de ácido prússico... Não, não direi que lhe mandasse ácido prússico... mas se estivesse no banco dos jurados, havia de lhe fazer cair em cima todo o peso da lei!”. N’ *A Cidade a as Serras* existem duas alusões ao ácido cianídrico: a primeira é a propósito do tédio parisiense de Jacinto (“Incessantemente aludia à morte como a uma libertação. Uma tarde

mesmo, no melancólico crepúsculo da Biblioteca, antes de refulgirem as luzes, consideravelmente me aterrou, falando num tom regelado de mortes rápidas, sem dor, pelo choque de uma vasta pilha eléctrica ou pela violência compassiva do ácido cianídrico.”), a outra é para contextualizar a impaciência de Zé Fernandes que, por fim, desafiará Jacinto para partirem para Tormes (“Aturaria eu ainda aquele Príncipe palpando amargamente a caveira, e, quando o crepúsculo entristecia a Biblioteca, aludindo, num tom rouco, à doçura das mortes rápidas pela violência misericordiosa do ácido cianídrico?”).

É interessante notar algum cuidado na actualização da nomenclatura química empregue. Assim, enquanto n’ *O Mistério da Estrada de Sintra* e n’ *O Crime do Padre Amaro* há referência ao ácido prússico, n’ *A Cidade e as Serras* (obra póstuma e não totalmente revista pelo autor), já o mesmo composto é designado pelo nome que ainda hoje perdura: ácido cianídrico (uma actualização de outrem?).

3. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os abundantes aspectos químico-farmacêuticos patentes na obra de Eça de Queirós – enquadrados no retrato literário da sociedade contemporânea, na linha dos modelos de Gustave Flaubert e Émile Zola, onde nem sempre a “nudez forte da verdade” se encobre sob o “manto diáfano da fantasia” - podem perfilar com (ou mesmo dominar sobre) os detalhes narrativos inerentes a outros domínios do saber científico-natural (Botânica, Física, Hereditariedade) também encontrados na obra do autor. É de referir que nas suas *Notas Contemporâneas* (no texto *Almanaques*), Eça chegou a delinear um ensaio sobre a História da Ciência.

Por um lado, este manancial de saber, que resulta do dinamismo das Ciências Naturais, e da Química em particular, em finais de Oitocentos, credibiliza, pela verosimilhança, o retrato fidedigno da vida trivial e da domesticidade, em sintonia com os códigos estético-literários defendidos em 1871 na 4.ª Conferência do Casino de Lisboa (“[O Realismo] É a análise com o fito na verdade absoluta”). Por outro, dada a celeridade com que a Química progredia na época, Eça, esse cidadão culto e multifacetado, demonstrava ser um homem ao corrente do “melhor” que a civilização tinha para oferecer ao mundo, e a Portugal.

Assim, pelo rigor do traço realista, pelo pragmatismo dos esboços sociais, pelo cosmopolitismo do seu ideário estético-literário e pelo universalismo do saber científico, Eça garante a canonicidade da sua obra, ombreando com os mais destacados vultos da Literatura do seu tempo no espaço mítico que Goethe designou de *Weltliteratur*.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem as frutuosas discussões com o Professor Jorge Calado, a gentil cedência de material bibliográfico por parte do Engenheiro Luís Ferro, a cuidada leitura crítica das colegas Ana Paula Esteves e Cláudia Cunha

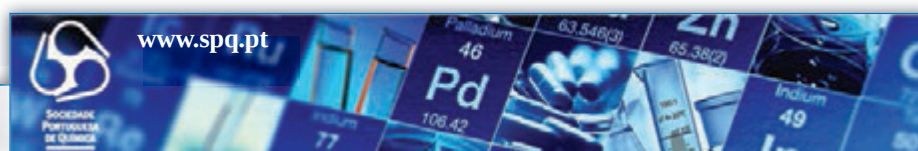
Pascoal, bem como as enriquecedoras sugestões dos revisores do manuscrito.

REFERÊNCIAS

- [1] E. Raviña, “The Evolution of Drug Discovery”, Wiley-VCH, Weinheim, 2011
- [2] A. Proença da Cunha, “Farmacognosia e Fitoquímica”, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2009
- [3] J. Thearle, J. Pearn, *Hist. Sci. Med.* **17** (1982) 257-261
- [4] G. Gryniewicz, M. Gadzikowska, *Pharmacol. Rep.* **60** (2008) 439-463
- [5] J.P. André, *J. Chem. Educ.* **90** (2013) 352-357
- [6] G.N. Tytgat, *Drugs* **67** (2007) 1343-1357
- [7] E.L. Figueiredo, F.P. Machado, *Insuficiência Cardíaca* **5** (2010) 72-78
- [8] C.K. Kokate, A.P. Purohit, S.B. Gokhale, “Pharmacognosy”, Nirali Prakashan, Pune, 2008
- [9] G. Lyß, A. Knorre, T.J. Schmidt, H.L. Pahl, I. Merfort, *J. Biol. Chem.* **27** (1998) 33508-33516
- [10] A.M. Peixoto (ed.) “Enciclopédia Brasileira”, Editora da Universidade de S. Paulo, S. Paulo, 1998
- [11] J. M. Calderón-Montaña, E. Burgos-Morón, C. Pérez-Guerrero, M. López-Lázaro, *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry* **11** (2011) 298-344
- [12] G.B. Rushman, N.J.H. Davies, R.S. Atkinson, “A Short History of Anaesthesia: The First 150 Years”, Butterworth-Heinemann, Oxford, 1996
- [13] M.H. Piwnik, in M.A. Ribeiro (coord.), “História Crítica da Literatura Portuguesa”, vol. VI, Editorial Verbo, Lisboa, 2000
- [14] J. Wawersik, *Anaesthesiol. Reanimation* **22** (1997) 144-152
- [15] D. Iluz, M. Hoffman, N. Gilboa-Garber, Z. Amar, *J. Pharm. & Pharmacol.* **4** (2010) 516-520
- [16] E.C. Pope, A. Ali, S.L. Conlan, I.D. Bowen, A.S. Clare, A.F. Rowley, *Aquat. Biol.* **4** (2008) 175-185
- [17] L. O. Hanuš, T. Řezanka, V. M. Dembitsky, A. Moussaieff, *Biomed. Papers* **149** (2005) 3-28
- [18] C. Koutsoudaki, M. Krsek, A. Rodger, *J. Agric. Food Chem.* **53** (2005) 7681-7685
- [19] M. A. ElSohly, D. Slade, *Life Science* **78** (2005) 539-548
- [20] K.T. Fitzgerald, A. C. Bronstein, K. L. Newquist, *Topics in Compan. An. Med.* **28** (2013) 8-12
- [21] T.F. Bachiega, J.P.B. de Sousa, J.K. Bastos, J.M. Sforcin, *Natural Product Research* **27** (2013) 1646-1650
- [22] M.A. Besten, V.C.G. Jasinski, Â. de G.L.C. Costa, D.S. Nunes, S.L. Sens, A. Wisniews Jr., E.L. Simionatto, D. Riva, J.B. Dalmarco, D. Granato, *J. Braz. Chem. Soc.* **23** (2012) 1041-1047
- [23] E.C. Wendt, *The Medical Record* **3** (1888) 597-598
- [24] P. Le Couteur, J. Burreson, “Napoleon’s Buttons“, Tarcher-Penguin, Nova Iorque, 2003
- [25] L.S. Goodman, A. Gilman A. (eds.), “The Biological Basis of Therapeutics”, MacMillan, London, 1970
- [26] J. Emsley, “Molecules at an Exhibition”, Oxford University Press, Oxford, 1998

ACONTECE

Na *ChemistryViews*, a revista online da *ChemPubSoc Europe* (associação de dezasseis sociedades europeias de Química em que se inclui a SPQ), pode encontrar uma entrevista com um professor do Instituto de Química Orgânica da Universidade Ruprecht Karls, Heidelberg, que nos conta o que “cozinha” no laboratório e o que cozinha em casa. No laboratório as suas preferências vão para a síntese e estudo de materiais com sistemas π conjugados, tais como fluoróforos cruciformes; em casa, o seu prato aromático favorito é rabo de boi com funcho. A entrevista e a receita estão disponíveis em: [//www.chemistryviews.org/details/ezone/4880511/Whats_Cooking_in_Chemistry_Uwe_Bunz.html](http://www.chemistryviews.org/details/ezone/4880511/Whats_Cooking_in_Chemistry_Uwe_Bunz.html)



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.

Visite o nosso novo site

ChemistryViews

**Alerts
& Events**

Videos & Blogs

**News
& Articles**

Join – register – benefit
with 300.000+ users on the platform!

Easy – fast – exciting
updated every day for you and
your work!

Spot your favorite content:

ChemistryViews.org



**ChemPubSoc
Europe**



WILEY-VCH

PECULIARIDADES NOS MECANISMOS MOLECULARES DE PROTEÍNAS EM SOLUÇÃO AQUOSA: EXEMPLO DA IMPORTÂNCIA DO EQUILÍBRIO ÁCIDO-BASE PARA APLICAÇÕES EM BIOTECNOLOGIA

Fernando Luís Barroso da Silva

Departamento de Química Teórica
Centro de Química – Universidade de Lund (Suécia)

e
Departamento de Física e Química
Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto – São Paulo (Brasil)
flbarroso@gmail.com

A complexação entre biomoléculas é um tópico importante em vários campos, desde a Bioquímica, às indústrias farmacêutica, alimentar e de cosméticos. A capacidade de descrever e controlar os mecanismos responsáveis por esses processos, em termos de uma descrição molecular, é um desafio para muitas aplicações práticas. Através da modelação molecular e simulações Monte Carlo, descrevemos aqui um mecanismo peculiar: a regulação de cargas em função do equilíbrio ácido-base. Tal fenómeno é responsável por forças mesoscópicas *atrativas* em sistemas (bio)coloidais, capazes de explicar a complexação de macropartículas com carga do mesmo sinal. Tal é aqui demonstrado através dos complexos lactoferrina-pectina e pectinametilsterase de cenoura-pectina, os quais ilustram este mecanismo geral que pode ser observado em vários outros sistemas coloidais.

1. INTRODUÇÃO

O comportamento de proteínas e de misturas de biopolímeros em solução é de considerável importância, tanto nas Ciências da Vida (praticamente todas as funções biológicas dependem da interacção entre proteínas), como em tecnologia (por exemplo em formulações farmacêuticas, em tecnologia dos alimentos, na imobilização de enzimas, na separação de proteínas e na tecnologia de (bio)processos em geral) [1-5]. Ao mesmo tempo, este tema oferece uma riqueza de informações e de desafios para o desenvolvimento das ciências exactas, revelando, por exemplo, peculiaridades das interacções físicas fundamentais [6-8].

Um caso particular de equilíbrio químico é o que envolve a protonação de grupos ionizáveis, o que leva ao aparecimento (e variação) da carga eléctrica de macromoléculas em solução aquosa. Como apresentaremos neste trabalho, a flutuação das cargas dos aminoácidos (aa) em função do equilíbrio ácido-base dos grupos ionizáveis resulta num mecanismo molecular bastante *sui generis* capaz de explicar a *atração* de proteínas com cargas eléctricas do mesmo sinal, contrariando o senso comum. Discutiremos aqui as interacções fundamentais envolvendo complexos de proteínas nestas situações, as quais, recentemente, começaram a ser teoreticamente desvendadas [6-8]. Tomaremos para estudo sistemas que incluem vastas classes de misturas relevantes: os *complexos proteína-polissacarídeo*. Estes encontram aplicações numa grande diversidade de problemas que extrapolam o contexto biológico, tais como as aplicações em nanoescala, por exemplo, na engenharia de veículos de transporte através do encapsulamento de ingredientes activos (farmacêuticos, alimentares, etc.), na protecção de proteínas adsorvidas, como estabilizantes na tecnologia de alimentos (gelados, bebidas lácteas de frutas, etc.), em (bio)separações, e muitos outros campos (incluindo as condições ideais para a cristalização de proteínas) [1-9].

Controlar sistemas e processos como estes, de maneira completa, requer a *quantificação* das interacções físicas fundamentais e o entendimento dos parâmetros físico-químicos envolvidos. A força física mais importante, a nível molecular, responsável pela complexação, é de origem electrostática, como indicada pela forte dependência da força iónica e do pH. Apesar da quantidade considerável de trabalhos experimentais, tanto aplicados, como em sistemas modelo, ainda existe relativamente pouco trabalho teórico e de modelação, principalmente que utilizem modelos que apresentem custos computacionais acessíveis e que, ao mesmo tempo, sejam suficientemente detalhados para poderem contribuir para o entendimento físico-químico e para o planeamento de sistemas de uso prático e tecnológico. Assim, tem-se aqui uma oportunidade de combinar ciência básica e aplicada, valendo-se de conceitos típicos dos livros básicos de Química.

Exploraremos aqui sistemas envolvendo a lactoferrina (LF) bovina [10] e a pectinametilsterase de cenoura (PME) [11]. As proteínas do leite (caseínas, albuminas, LF, β -lactoglobulina, etc.) [10] são sistemas que apresentam uma riqueza de propriedades físico-químicas (muitas destas proteínas são óptimos “protótipos” de biomoléculas envolvidas no metabolismo, em mecanismos de activação de enzimas, como modelos para o enovelamento proteico e para outros estudos bioquímicos), em conjunto com uma importância prática e directa (por exemplo, na estabilização de iogurtes de frutas e do seu alto valor biológico (as proteínas do leite possuem peptídeos bioactivos que actuam como agentes anti-hipertensivos, anti-inflamatórios, anti-cancerígenos, antimicrobianos, reguladores da resposta imune, entre outros), para a qual há um grande volume de dados experimentais a necessitarem de uma melhor interpretação sob o ponto de vista físico. Já a PME é uma enzima que catalisa a pectina e apresenta características interessantes para uma comparação com a LF.

2. INTERACÇÕES ELECTROSTÁTICAS EM SOLUÇÃO AQUOSA

De acordo com a classificação tradicional das forças da natureza (gravitacionais, electromagnéticas, nucleares fortes e nucleares fracas), as *forças intermoleculares* são descritas como interações de origem electromagnética. A energia de interação entre dois átomos resulta das forças eléctricas entre as entidades carregadas de que estes átomos são feitos. Por simplicidade, e balizando a nossa discussão de forma clássica, assumiremos que a origem da carga eléctrica destes átomos provém dos electrões e dos prótons. Consequentemente, são possíveis diferentes forças eléctricas: interação entre múltiplos permanentes, indução, dispersão, repulsão electrostática e transferência de carga [12].

Quando se aborda o tema “*interacções electrostáticas em e entre biomoléculas*”, na literatura a linguagem não é sempre precisa. Normalmente, tem-se em mente apenas as interações entre cargas fixas (interacções de Coulomb), mesmo que todas as interações assinaladas acima sejam por natureza electrostáticas e estejam presentes nas biomoléculas. É importante então esclarecer que, no caso em estudo, se consideram interações de Coulomb, não sendo consideradas as distorções nas nuvens electrónicas e/ou transferência de carga.

A combinação das características dos sistemas (bio)coloidais com o pH, electrólitos e temperatura resulta numa diversidade complexa e rica de mecanismos peculiares associados à lei de Coulomb. Aparecem *forças mesoscópicas* de importância elevada para a organização e função molecular de sistemas biológicos e de interesse industrial [7-8]. Apesar das aplicações em diferentes áreas (das proteínas ao cimento!), diversidade de formas geométricas dos sistemas e interesses científicos, os principais “actores” desses mecanismos são sempre as cargas e os tamanhos iónicos. Alguns sistemas também podem apresentar efeitos iónicos específicos, conhecidos como “efeito Hofmeister” [13].

Centrando-nos na carga e no tamanho iónico, os fenómenos electrostáticos são usualmente classificados de acordo com o chamado “regime de acoplamento electrostático” [14]: (a) *fraco* (raf), onde os iões livres (contra-iões e sal adicionado) são partículas monovalentes (ex. Na^+), as quais blindam as interações electrostáticas, e o sistema é caracterizado por forças repulsivas, como descrito pela teoria de DVLO [15]), e (b) *forte* (raF), onde iões multivalentes (ex. Ca^{2+}) dão origem a forças *atractivas* devido a correlação (de carga e tamanho) ião-ião (correlações iónicas) [16]. Estas correlações também são responsáveis pelo fenómeno conhecido como “sobrecarga” (*overcharging*) [17,18]. O parâmetro de acoplamento electrostático é dado por: $\Xi = 2\pi z_k^3 l_b^2 \alpha$, onde z_k é a valência do contra-ião, l_b é o comprimento de Bjerrum [$l_b = e^2/4\pi\epsilon_0\epsilon_s KT$], onde os termos e , ϵ_0 , ϵ_s , K e T são, respectivamente, a carga elementar ($e = 1,602 \times 10^{-19}$ C), a permissividade do vácuo ($\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12}$ C²/Nm²), a constante dieléctrica do solvente, a constante de Boltzmann ($K = 1,3807 \times 10^{-23}$ J·mol⁻¹·K⁻¹) e a temperatura (expressa em kelvin), i.e., uma medida da

distância na qual duas cargas elementares, num dado solvente, interagem com uma unidade de energia térmica (KT) [14]. Pode ser observado directamente que o aumento de z_k dos contra-iões aumenta Ξ . Para $\Xi \gg 1$, os contra-iões são atraídos fortemente pela superfície carregada e verifica-se uma tendência para o sistema sofrer atracção. No entanto, esta é uma descrição simplificada da realidade. Mesmo no raf, podem ser observados comportamentos anómalos (i.e. *atracção*) devido a outros fenómenos: (a) blindagem electrostática devido a concentração do macroião [19] e (b) mecanismo de regulação de cargas (reg) [6-8,20]. Neste trabalho, abordamos especificamente os efeitos relacionados com a reg.

As proteínas são entidades ionizáveis cuja carga líquida pode variar de positiva a negativa em função do aumento do pH, definindo a sua estabilidade e função [21-23]. Dependendo da quantidade de grupos tituláveis (α -carboxílico, fenol, imidazol, ϵ -amino, guanidina, carboxílico aspártico, carboxílico glutâmico, α -amino e tiol) [22-23], da sua localização na sequência primária, da configuração tridimensional e do pH, algumas proteínas são altamente carregadas. Outras moléculas biológicas como o DNA e o RNA comportam-se de maneira semelhante [22]. O ambiente biológico também contém iões salinos com valências variadas, os quais podem modular as interações e, fisiologicamente, regular as macromoléculas [24].

A regulação de cargas é o mecanismo particular gerado pela flutuação da carga dos aa em função do equilíbrio químico num determinado pH, o que resulta em forças *atractivas* para a complexação macromolecular mesmo no regime de *baixo* acoplamento electrostático (quando $\Xi < 1$). Esta flutuação é medida pela capacitância (C) da proteína, definida como $\langle Z^2 \rangle - \langle Z \rangle^2$, onde Z é a valência da proteína numa dada configuração para um determinado pH [6-8, 25]. Os $\langle \rangle$ indicam valores médios e reflectem o facto dos aa estarem protonados ou não. Experimentalmente, C pode ser determinada de acordo com $C \propto \frac{dZ}{dpH}$ [7].

Em termos históricos, as abordagens teóricas para o problema da complexação remetem-nos para o trabalhos pioneiros do holandês J.T.G. Overbeek no que respeita ao desenvolvimento das primeiras teorias para a complexação de biopolímeros carregados com carga oposta (especialmente no contexto de coacervados) [31]. Alguns estudos [2-3] vieram, no entanto, colocar em questão as teorias desta natureza, por terem revelado um aparente paradoxo: a formação de complexos moleculares em condições de pH onde as cargas “líquidas” das duas macromoléculas envolvidas têm o *mesmo* sinal, na presença de baixa concentração de contra-iões *monovalentes*, de modo a que as correlações iónicas *não* sejam expressivas. O termo complexação “no sentido errado” passou então a ser usado, significando que o polianião forma um complexo com a proteína a um valor de pH acima do seu ponto isoeléctrico (pI) [3]. A interpretação concentrou-se na explicação baseada na existência de “patamares de carga”, regiões localizadas com alta complementaridade de densidade de carga na superfície proteica [3]. Seguindo este raciocínio, um monómero do polianião deveria ligar-se a uma região com elevada concentração

de cargas positivas da outra macromolécula, e vice-versa. O mesmo tipo de argumento é usado quando se discute a interacção de duas proteínas no seu ponto isoeléctrico ($\text{pH} \approx \text{pI}$). Uma alternativa mais formal seria em termos de uma expansão multipolar, isto é: para dois macroiões neutros, os termos dominantes seriam as interacções dipolo-dipolo, dipolo-quadrípolo, etc. [6-8].

Kirkwood e Shumaker (KS) [32], em 1952, previram analiticamente que as flutuações nas cargas dos aa (decorrentes do equilíbrio ácido-base e no sentido da variação da carga fixa de um monopólio eléctrico, e não da flutuação da densidade electrónica de um átomo) de duas proteínas podem resultar em forças electrostáticas *atractivas*. Para a condição de $\text{pH} \approx \text{pI}$ [6-8], demonstramos para vários complexos que a atracção é possível em termos *puramente* electrostáticos, podendo ser de várias unidades de energia térmica (KT). Em termos analíticos, a energia livre de interacção $[A(R)]$ para duas macromoléculas A e B, separadas pela distância R pode ser calculada de acordo com:

$$\frac{A(R)}{KT} \approx \frac{l_B \langle Z_A \rangle \langle Z_B \rangle}{R} - \frac{l_B^2}{2R^2} (C_A C_B + C_A \langle Z_B \rangle^2) + C, \quad (\text{Eq. 1})$$

onde o segundo termo corresponde à regulação de cargas, e é sempre atractivo.

3. MODELOS

Utilizando modelos simplificados, o nosso objectivo, neste trabalho, é ilustrar o mecanismo da regulação de cargas. Pela evidência dos efeitos de sal e de pH, é sabido que as interacções electrostáticas devem ter um papel de destaque. Por isso, essa interacção será a principal componente do modelo. Invocando um número mínimo de parâmetros, têm sido concebidos e resolvidos por simulações Monte Carlo (MC) vários modelos contínuos mais mesoscópicos, conhecidos como *coarse graining models* [6-8, 25, 26]. Os modelos verdadeiramente atomísticos, incluindo moléculas de água explícitas, ainda não conseguem atingir as escalas de tempo e de tamanho de forma a explorar a complexação de proteínas-proteínas a diferentes valores de pH e de força iónica, e, menos ainda, de proteínas-polissacarídeos através de simulações computacionais. O custo computacional (tempo de processamento e exigência de supercomputadores, por exemplo) torna-se proibitivo nesta classe de modelo. Por outro lado, os modelos simplificados que ainda são frequentemente usados em polímeros e em ciência coloidal (como os modelos de esferas ligadas para representar um polímero, ou modelos esféricos para representar uma proteína) dificilmente podem ser aplicados a sistemas reais quando a heterogeneidade química é crucial. Esta situação foi resolvida desenvolvendo modelos intermédios, em termos de detalhe, onde podemos acomodar os detalhes mais relevantes da heterogeneidade química das proteínas. Isso inclui, por exemplo, a descrição da forma da proteína ao nível de modelação dos seus aa, com a descrição da localização de cada carga eléctrica ao nível dos grupos químicos individuais [6-8, 25]. Podemos também incluir detalhes da associação/dissociação de OH^- e de H^+ , os quais são cruciais para a complexação [6-8, 20] mas que

são, normalmente, ignorados, mesmo nas simulações ditas de detalhe atomístico. É importante notar que uma comparação recente entre uma simulação atomística com flexibilidade proteica e água explícita usada para caracterizar interacções efectivas entre moléculas de lisozima mostrou as mesmas características principais que modelos simplificados [27]. Em todas as simulações MC, a temperatura foi mantida constante em 298 K e as espécies carregadas foram confinadas dentro de um célula esférica electricamente neutra, cujo raio $R_{\text{célula}}$ é determinado pela concentração de proteína (c_p). Isto corresponde ao chamado “modelo da célula” [28]. A motivação física deste modelo é equivalente a dividir a solução electrolítica em células, onde cada uma contém uma macromolécula (ou um par de macromoléculas) com os seus electrólitos (contra-íões e o sal adicionado). É assumido que não existem interacções entre as diferentes células do sistema real. A única maneira em que são consideradas as interacções entre as células é indirectamente através da definição de c_p .

As cargas iónicas livres são descritas pelo modelo primitivo restrito. Cada ião móvel k com valência z_k é tratado explicitamente como uma esfera-rígida de raio R_k , enquanto o solvente é tratado por um meio dieléctrico sem estrutura caracterizado pela sua constante dieléctrica estática ϵ_s . Suportado por estudos anteriores [6,19], não é introduzida no modelo qualquer descontinuidade dieléctrica. A mesma constante dieléctrica ϵ_s é assumida para modelar o solvente e o interior de todas as espécies. A macromolécula é tratada como um corpo rígido fixo no centro da célula de simulação. A justificação para se adoptar um modelo sem graus internos de liberdade está no facto de estarmos interessados em caracterizar propriedades termodinâmicas como as derivadas da energia livre, as quais são função da distância de separação entre as espécies (p. ex. o potencial de força média).

Os sistemas a simular consistem tipicamente numa proteína, ou numa proteína e uma cadeia de polissacarídeo, imersa numa solução electrolítica, estando todo o sistema confinado nesta “caixa de simulação” esférica e neutra – como se ilustra na Figura 1. As coordenadas dos átomos proteicos foram obtidas da base de dados de proteínas (<http://www.pdb.org>), cujos códigos para referências são 1BLF (LF) e 1GQ8 (PME).

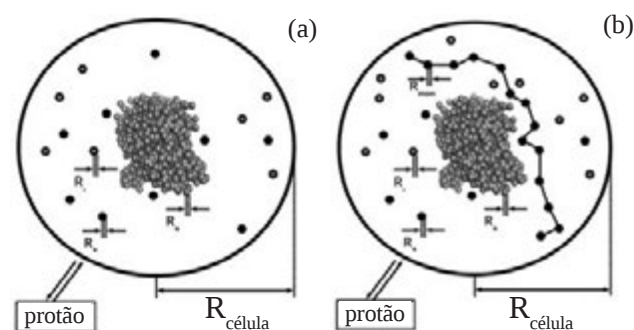


Figura 1 – Representação esquemática do modelo da célula, onde uma macromolécula biológica é modelada considerando todos os seus átomos e a solução electrolítica (contra-íões e sal adicionado) é descrita pelo modelo primitivo restrito. (a) Na ausência do polieletrólito; (b) Na presença do polieletrólito

A Hamiltoniana efectiva consiste essencialmente num termo de curto alcance do tipo esfera-rígida, e num termo de longo alcance. É também incluído um termo restritivo para manter todas as partículas confinadas no interior da célula. Esta estratégia permite o tratamento exacto das interacções electrostáticas, inclui integralmente o efeito de força iónica, reduz o custo computacional para obtenção da energia livre, e evita ainda os inconvenientes de escolha dos campos de força, “truncagem” das interacções de longo alcance e incompatibilidade das escalas de tempo entre os valores reais do evento biológico e o passível de ser simulado.

Desta forma, dois sítios i e j (tanto uma carga de um aa da proteína, um ião livre, ou ainda um monómero do polielectrólito) separados espacialmente por uma distância $r_{ij} > R_i + R_j$ contribuem com a energia potencial electrostática [$U^{ele}(r_{ij})$] simplesmente pelo potencial de Coulomb clássico:

$$U^{ele}(r_{ij}) = \frac{z_i z_j e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_c r_{ij}} \quad (\text{Eq. 2})$$

onde z_i e z_j denotam a valência das cargas i e j , respectivamente. Quando $r_{ij} \leq R_i + R_j$, é necessária a prevenção do colapso Coulombico entre as cargas e a modelação da repulsão característica entre as nuvens electrónicas dos átomos. Isto é feito através da introdução do potencial de esfera-rígida [$U^{er}(r_{ij})$]:

$$U^{er}(r_{ij}) = \begin{cases} \infty, & \text{para } r_{ij} \leq (R_i + R_j) \\ 0, & \text{nas demais situações} \end{cases} \quad (\text{Eq. 3})$$

Este potencial de interacção também modela a exclusão do volume dos macroiões. Para manter todas as espécies confinadas dentro da célula, é incluído um campo externo [$U^{ext}(r_i)$]:

$$U^{ext}(r_i) = \begin{cases} 0, & \text{para } (R_i + R_p) \leq r_i \leq R_{célula} \\ \infty, & \text{nas demais situações.} \end{cases} \quad (\text{Eq. 4})$$

A energia configuracional total do sistema [$U(\{r_k\})$] é definida pela combinação das Eqs. (2)-(4):

$$U(\{r_k\}) = \sum_{i=1}^{N_c+N_s} U^{ext}(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_s} [U^{ele}(r_{ij}) + U^{er}(r_{ij})] \quad (\text{Eq. 5})$$

onde N_c e N_s correspondem aos números do contra-íões e iões de sal adicionados ao sistema, respectivamente. O número total de cargas é dado por $N = N_c + N_s + N_p$, o que inclui também o número de átomos carregados da proteína (N_p). Nas simulações envolvendo o polielectrólito, é adicionado, na Eq. 5, o termo de potencial de interacção de ligação ($u^{ligação}$). Assumimos uma cadeia altamente flexível, formada por N_{mon} esferas rígidas de raio R_{mon} com carga eléctrica ($Z_{mon}e$) e ligadas pelo potencial harmónico de interacção. O $u^{ligação}$ entre dois monómeros vizinhos é calculado como:

$$\beta u^{ligação} = \frac{l_b}{2r_{min}^3} \sum_{i=1}^{N_{mon}-1} (r_{i,i+1})^2 \quad (\text{Eq. 6})$$

onde $r_{i,i+1}$ é a distância entre o monómero i e o monómero $i+1$, r_{min} é a distância de separação correspondente ao mínimo de energia para um dímero. Em todas as simulações com polielectrólitos, adoptamos $N_{mon} = 21$ monómeros, $R_{mon} = 2$

Å, $Z_{mon} = -1$ e $r_{min} = 4$ Å (isso corresponde a uma separação monómero-monómero de aproximadamente 7.4 Å). A carga dos monómeros do polielectrólito é mantida constante.

Um reservatório de protão é acoplado à célula para estabelecer um pH constante no sistema. Após algumas tentativas de mover as cargas móveis, é feita uma tentativa de remover/insere protões nos grupos tituláveis da proteína. Na verdade, a protonação de um grupo ácido significa que um ácido foi adicionado à solução. Então, na simulação, a protonação é balanceada pela inserção de uma carga negativa móvel para manter a electroneutralidade do sistema. A aceitação/rejeição de uma tentativa para mudar o estado de ionização de um resíduo é baseada na variação de energia:

$$\Delta U_{mudança} = \Delta U_{ele} \pm kT \ln 10 (pH - pK_a) \quad (\text{Eq. 7})$$

onde ΔU_{ele} é a correspondente variação na energia Coulombica, e pK_a é a constante de dissociação do composto modelo. Esses valores são retirados de resultados experimentais da literatura [22].

Diversas quantidades características (e que podem ser directamente comparadas com dados experimentais) podem ser medidas em simulações como as aqui reportadas (p.ex. propriedades termodinâmicas e microscópicas tais como energia livre de complexação, segundo coeficiente do virial, estequiometria da ligação, constante de ligação, etc.). Aqui, apresentaremos curvas de titulação (Z vs. pH), curvas de capacitância (C vs. pH) e potenciais de força média [$w(r)$].

As curvas de titulação e de capacitância foram determinadas a partir da valência da proteína em função do pH ao longo da fase de produção das simulações MC. O $w(r)$ foi determinado através do uso de histogramas, i.e. de funções de distribuição radial [$g(r)$] determinadas através de histogramas de largura 0,5Å, e depois convertidas em $w(r)$ [$= -KT \ln g(r)$].

4. TITULAÇÃO DAS PROTEÍNAS

A primeira etapa no estudo de qualquer processo envolvendo interacções electrostáticas é sempre a caracterização das proteínas individuais (sem a presença da segunda macromolécula) em solução electrolítica. Além da importância *per si*, isso permite a escolha das janelas de pH mais prováveis para a complexação. Durante as simulações em diferentes valores de pH, são medidas propriedades como as valências (ou cargas) médias e suas flutuações, e, desta maneira, quantificada a grandeza que se convencionou [6-8, 25] chamar de capacitância da proteína. As Figuras 2 e 3 mostram estas curvas para as proteínas LF e PME, obtidas após 10^7 ciclos de MC na fase de produção. Esses dados descrevem o comportamento resultante de cada um dos grupos tituláveis na presença de todos os demais que estão presentes na estrutura envelada para cada um desses polipeptídeos, reflectindo ainda os efeitos das cargas eléctricas livres (contra-íões e sal) da solução electrolítica.

Através das curvas de titulação, pode determinar-se os valores de pH em que estas proteínas estão carregadas posi-

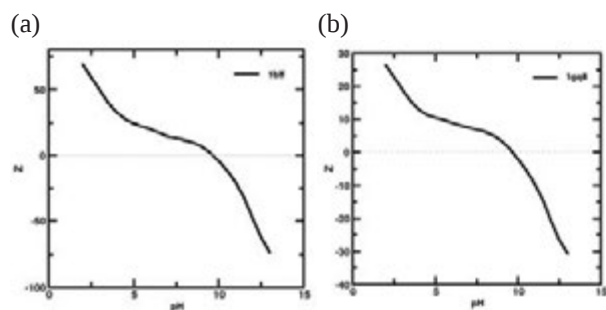


Figura 2 – Curvas de titulação obtidas em simulações Monte Carlo, em baixa concentração salina e proteica, para as proteínas (a) LF e (b) PME. A concentração de sal é 0,025 M numa caixa esférica de raio $R_{célula} = 200 \text{ \AA}$

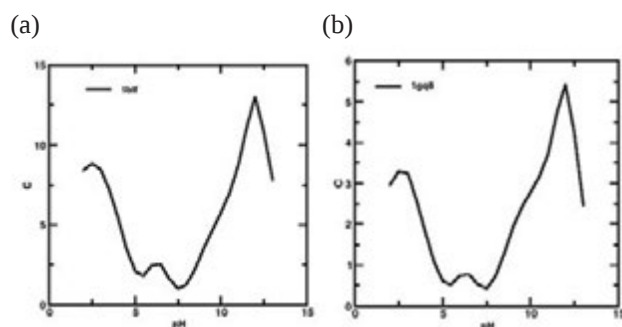


Figura 3 – Curvas de capacitância obtidas em simulações Monte Carlo, em baixa concentração salina e proteica, para as proteínas (a) LF e (b) PME. Restantes condições como descrito na Figura 2

tiva e negativamente, assim como os seus pIs. Para a LF e PME, os valores de pI são 9,7 e 9,6, respectivamente. Na literatura, são reportados valores experimentais de 6,8-9,0 para a LF [29] e $>9,3$, para a PME [11]. Estas diferenças são esperadas em função das dificuldades em precisar as quantidades reais de iões presentes em experiências laboratoriais (os quais contribuem com a blindagem electrostática), as características e precisão das técnicas experimentais, etc. Isso pode ser notado pelo grande intervalo de valores reportados experimentalmente. Outro aspecto a ser considerado é o facto de utilizarmos nas simulações estruturas cristalográficas, as quais estão sujeitas a artefactos, e ainda serem mantidas rígidas. É interessante notar que outros trabalhos teóricos fornecem o valor de 9,4 para o pI da LF [30]. Embora os pIs destas proteínas apresentem valores semelhantes, a carga da LF é sempre mais positiva e negativa, respectivamente, nos regimes de pH ácido e básico, o que acentua as interações nesses extremos de pH.

As flutuações de carga são maiores quando o pH está próximo do pI de um determinado aminoácido. Por exemplo, uma proteína rica em lisosima tende a ter um pico no pH 10,4 ($pK_{\text{alis}} = 10,4$ [22]). Destas proteínas, a LF é a molécula com mais lisinas (53), em comparação com a PME, que possui 15. No pH 10,4, as suas capacitâncias são, respectivamente, 6,7 e 3,1. A proporção não é exactamente a mesma do número de resíduos, pois, outros aa presentes na estrutura afectam a ionização destas lisinas, assim com a estrutura tridimensional particular de cada proteína. Por estas curvas de capacitância se percebe a semelhança qualitativa entre a LF e a PME, o que se tornará particularmente interessante nas discussões abaixo sobre a reg, visto ser este um parâmetro importante para o mecanismo. Por

esta análise, já é possível prever que a LF tende a formar complexos mais estáveis do que a PME. Note-se como os picos são bem mais elevados nos pHs mais básicos da LF e PME, em comparação com os valores calculados no pI.

5. COMPLEXAÇÃO

Estudamos aqui o efeito do pH, analisando os complexos LF-pectina e PME-pectina. Para garantir que os efeitos de correlação ião-ião acima discutidos possam ser desconsiderados, as simulações foram executadas apenas com iões monovalentes (1:1). Foram considerados detalhes atômicos das proteínas no nosso modelo. Todos os átomos presentes nas estruturas tridimensionais são descritos por esferas rígidas de raio $R_a = 2 \text{ \AA}$ e valência Z_a , os quais não podem mover-se durante as simulações. A proteína é colocada no centro da caixa de simulação. As cargas são atribuídas e variadas em função do pH. O protocolo para a titulação é o discutido acima (Secção 3) e o polieletrólito é introduzido como espécie real na célula de simulação junto com a proteína e demais iões – como se ilustra na Figura 1B. O polímero pode movimentar-se livremente por toda a célula respeitando o critério de Metropolis.

Estas simulações foram realizadas no ensemble semi-canónico usando o algoritmo padrão de Metropolis MC [26], com os deslocamentos aleatórios das espécies móveis (contra-iões, iões do sal e monómeros do polianião) dentro da célula de $R_{célula} = 220 \text{ \AA}$. Foram necessários 10^9 , 10^{10} e 10^{11} ciclos de MC para as fases de pré-equilíbrio, equilíbrio e produção, respectivamente.

Na Figura 4 apresentamos os resultados de $w(r)$ a diferentes valores de pH (os quais foram escolhidos na vizinhança do pI de cada proteína, capturando regimes de atracção e de repulsão). Para ambos os sistemas observamos que a *atração* ocorre em condições onde as cargas das moléculas têm o *mesmo* sinal. Esta atracção observada é fortemente dependente do pH e é resultado de uma propriedade físico-química intrínseca das proteínas: a sua habilidade em regular a sua carga [6-8, 20]. Isso pode ser comprovado através da observação de que quanto maior a capacitância da proteína (C), maior o poço de potencial encontrado. Tal facto está de acordo com o previsto pela Eq. 1, onde, mantendo-se todos os termos constantes, um aumento no valor de C provoca um crescimento significativo na componente atractiva da energia livre. Para a PME, por exemplo, no intervalo de pH entre 8 e 10, a C desta proteína aumenta de 0,7 a 2,8. De forma consistente, os dados das simulações MC, mostrados na Figura 4B, indicam que o sistema deixa de ser repulsivo (em pH 8 com $C=0,7$) e torna-se atractivo (em pH 10 com $C=2,8$). Das duas proteínas aqui estudadas, a LF é a molécula que possui as capacitâncias mais elevadas e, por consequência, exhibe mínimos bastante pronunciáveis em $w(r)$. Nas três curvas de $w(r)$ mostradas na Figura 4A, as atracções observadas na derivada da energia livre têm mínimos superiores a $-15KT$. Esse é um sistema que apresenta elevada tendência de complexação.

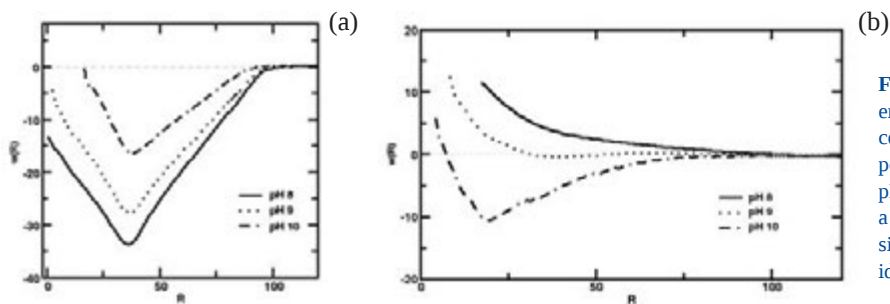


Figura 4 – Potencial de força média $[w(r)]$ em função da distância de separação do centro da proteína e do centro de massa do polianião (carga $-21e$) a diferentes valores de pH. A concentração de sal é baixa (7,5mM) e a de proteína é de 0,4 mM. Dados obtidos em simulações Monte Carlo. (a) pectina-LF (PDB id 1BLF). (b) pectina-PME (PDB id 1GQ8)

6. CONCLUSÃO

Através de simulações Monte Carlo, demonstramos um mecanismo molecular peculiar, importante e geral observado no domínio (bio)coloidal. A regulação de cargas resulta em forças mesoscópicas *atractivas* de origem *puramente* electrostática, as quais revelam as limitações da teoria de DVLO, um dos *landmarks* da ciência dos colóides. Tal mecanismo evidencia a riqueza e a complexidade da combinação das características dos sistemas (bio)coloidais com o pH, electrólitos e temperatura, os quais abrem novos horizontes para o entendimento e a manipulação racional da organização e da função molecular de sistemas biológicos e dos sistemas de interesse industrial.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos o apoio de Capes/MCT, Fapesp e *Swedish Research Council*.

REFERÊNCIAS

- [1] T.M. Devlin, *Textbook of Biochemistry with Clinical Correlations*, Wiley-Liss, Nova Iorque, 1997
- [2] S.L. Turgeon, C. Schmitt, C. Sanchez, *Curr. Opin. Colloid. Interf. Sci.* **12** (2007) 166-178
- [3] R. de Vries, M. Cohen-Stuart, *Curr. Opin. Colloid. Interf. Sci.* **11** (2006) 295-301
- [4] O.G. Jones, D.J. McClements, *Adv. in Colloid and Interface Science* **167** (2011) 49-62
- [5] K. Chen, *Biomacromolecules* **12** (2011) 2552-2561
- [6] F.L.B. Da Silva, B. Jönsson, M. Lund, T. Åkesson, *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 4459-4464
- [7] B. Jönsson, M. Lund, F.L.B. Da Silva, in "Food Colloids: Self-Assembly and Material Science"; E. Dickinson, M.E. Leser (eds), Royal Society of Chemistry, 2007, Cap. 9, p. 129-154
- [8] F.L.B. Da Silva, B. Jönsson, *Soft Matter* **5** (2009) 2862-2868
- [9] R. Piazza, *J. Crystal Growth* **196** (1999) 415-423
- [10] H.M. Farrell Jr., R. Jimenez-Flores, G.T. Bleck, E.M. Brown, J.E. Butler, L.K. Creamer, C.L. Hicks, C.M. Hollar, K.F. Ng-Kwai-Hang, H.E. Swaisgood, *J. Dairy Sci.* **87** (2004) 1641-1674
- [11] R.P. Jolie, T. Duvetter, A.M. van Loey, M.E. Hendrickx, *Carbohydrate Research* **345** (2010) 2583-2595
- [12] G.C. Maitland, M. Rigby, E.B. Smith, W.A. Wakeham, "Intermolecular forces – Their origin and determination. Oxford University Press", Oxford, 1981
- [13] A. Salis, F. Cugia, D.F. Parsons, B.W. Ninham, M. Monduzzi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14** (2012) 4343-4344
- [14] A. Naji, A. Arnold, C. Holm, R. Netz, *Europhysics Letters* **67** (2004) 130-136
- [15] E.J.W. Verwey, J.Th.G. Overbeek, "Theory of the Stability of Lyophobic Colloids", Elsevier, Amsterdam, 1948
- [16] M. Borkovec, B. Jönsson, G.J.M. Koper, "Ionization Processes and Proton Binding in Polyprotic Systems: Small Molecules, Proteins, Interfaces and Polyelectrolytes", Leiden University, 1999
- [17] J. Lyklema, *Colloids and Surfaces A: Phys. Eng. Aspects* **291** (2006) 3-12
- [18] C. Labbez, B. Jönsson, M. Skarba, M. Borkovec, *Langmuir* **25** (2009) 7209-7213
- [19] S.J. Carvalho, R.C.T. Ghiotto, F.L.B. Da Silva, *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 8832-8839
- [20] P.M. Biesheuvel, A. Wittemann, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 4209-4214
- [21] J.B. Matthew et al., *CRC Crit. Rev. Biochem.* **18** (1985) 91-197
- [22] T.K. Harris, G.J. Turner, *IUBMB Life* **53** (2009) 85-98
- [23] Y. Nozaki, C. Tanford, *Methods Enzymol.* **11** (1967) 715-734
- [24] B. Garcia-Moreno, *Methods Enzymol.* **259** (1995) 512-538
- [25] A.A.R. Teixeira, M. Lund, F.L.B. Da Silva, *J. Chem. Theo. Comput.* **6** (2010) 3259-3266
- [26] D. Frenkel, B. Smit, "Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications (Computational Science)", Academic Press, 2001
- [27] G. Pellicane, G. Smith, L. Sarkisov, *Phys. Rev. Letts.* **101** (2008) 248102-4
- [28] R.A. Marcus, *J. Chem. Phys.* **23** (1955) 1057-1068
- [29] F. Berlutti, F. Pantanella, T. Natalizi, A. Frioni, R. Paesano, A. Polimeni, P. Valenti, *Molecules* **16** (2011) 6992-7018
- [30] J.M. Steijns, A.C.M. van Hooijdonk, *Br. J. Nutr.* **84**, Suppl. 1 (2000) S11-S17
- [31] J.T.G. Overbeek, M.J. Voorn, *J. Cell. Comp. Physiol.* **49**, Suppl. 1 (1957) 7-26
- [32] J.G. Kirkwood, J.B. Shumaker, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **38** (1952) 863-871

O MODELO DA ESFERA RÍGIDA EM FOLHA DE CÁLCULO: GEOMETRIAS DE REPULSÃO MÍNIMA DA TETRA À NONACOORDENAÇÃO

Mário Valente

Colégio D. Duarte, Porto
madmage1@yahoo.com

Neste trabalho descreve-se a utilização do modelo da esfera rígida, em folha de cálculo, para determinação de geometrias moleculares de repulsão mínima, com o propósito de demonstrar a possibilidade de utilização de meios informáticos ubíquos, em conjunto com modelos teóricos simples, para a realização de modelações úteis em Química. Como resultado são descritas as geometrias ideais mais estáveis segundo este modelo, para moléculas do tipo AB_n , com $n = 4$ a 9 .

INTRODUÇÃO

Numa época em que a modelação computacional apresenta um interesse crescente nos mais variados campos, constituiu para nós um desafio pedagógico interessante a elaboração de uma aplicação informática que fosse simultaneamente um exemplo de modelação computacional aplicada à Química e fizesse uso de conceitos de Matemática e Física suficientemente simples para poderem ser entendidos por alunos dos últimos anos do ensino secundário. Nos programas da disciplina de Física e Química A (níveis 1 e 2) [1] mencionam-se, na sua componente de Química, geometrias moleculares simples, bem como na sua componente de Física, campo eléctrico e atracção / repulsão electrostática: a base teórica deste modelo.

Como ferramenta de trabalho considerou-se a utilização de uma folha de cálculo, já que este instrumento é hoje acessível de forma praticamente ubíqua.

Neste artigo relatam-se os resultados obtidos para a determinação das geometrias de repulsão mínima até à nonacoordenação, portanto bem além do limite da hexacoordenação considerado ao nível da disciplina opcional de Química do 12.º ano, e mais além ainda do limite da tetracoordenação, considerado na disciplina de Física e Química A.

É importante notar que para espécies moleculares nas quais um átomo central está rodeado por quatro a seis átomos periféricos, cada número de coordenação específico apresenta geralmente uma ou duas geometrias bastante mais frequentes do que outras possíveis. Para números de coordenação superiores a seis aumenta o número de geometrias de repulsão mínima já que as diferenças energéticas entre várias geometrias possíveis se esbatem, permitindo que, à temperatura ambiente, as referidas espécies moleculares assumam uma de várias geometrias possíveis ou até que apresentem geometrias fluxionais [2].

DESCRIÇÃO DO MODELO

Como base teórica usou-se o **Modelo da Esfera Rígida** que se baseia na distribuição de um dado número de cargas

pontuais (representando os átomos periféricos) à superfície de uma esfera em cujo centro se encontra o átomo central. De seguida a posição das cargas à superfície da esfera é variada por forma a minimizar a repulsão total entre elas.

Usando uma folha de cálculo (*Microsoft® Office Excel 2003*) criou-se uma tabela contendo as coordenadas esféricas angulares (θ , φ) de cada uma das cargas pontuais distribuídas numa geometria de coordenação próxima da desejada. É evidente que se torna desnecessário definir especificamente a coordenada esférica r , já que o seu valor é fixo (aqui tomado como unitário) e igual para todas as cargas pontuais - desta aproximação deriva o nome do modelo utilizado.

Numa outra tabela as coordenadas esféricas angulares foram convertidas em coordenadas cartesianas (X , Y , Z), segundo:

$$(\sin(\theta) \cdot \cos(\varphi), \sin(\theta) \cdot \sin(\varphi), \cos(\theta)) \rightarrow (X, Y, Z) \quad (\text{Eq. 1})$$

O cálculo da repulsão para cada par de cargas pontuais, $R_{a,b}$, foi efectuado segundo:

$$R_{1,2} = ((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2)^{-\epsilon} \quad (\text{Eq. 2})$$

em que (x_1, y_1, z_1) e (x_2, y_2, z_2) são as coordenadas cartesianas das cargas pontuais **1** e **2**, respectivamente. Em vez do expoente -2 (para uma repulsão puramente electrostática) usou-se o expoente -6 por ser considerado consensualmente [3-6] como o que apresenta resultados mais próximos dos experimentais.

A repulsão total, R_T , foi calculada como a soma de todas as repulsões entre os pares de um total de n cargas pontuais:

$$R_T = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n R_{i,j} \quad (\text{Eq. 3})$$

As geometrias moleculares de repulsão mínima, assumidas como sendo as mais estáveis, foram então determinadas fazendo variar gradualmente as coordenadas angulares de

cada uma das cargas pontuais (isoladamente ou em grupo) até se atingir um mínimo local do valor de R_T (ver Nota 1).

A visualização das geometrias resultantes dos cálculos foi realizada usando a versão experimental (gratuita) do programa *ChemCraft* [7]. Bastando para tal copiar as coordenadas cartesianas dos átomos para o *Bloco de Notas* do *Windows* (*Microsoft*®) e construir com elas um ficheiro em que cada linha corresponde a um átomo (o central ou um dos periféricos) e contém o número atômico do átomo seguido das suas coordenadas X , Y e Z . Cada valor numérico deve ser separado dos outros por um espaço (ver Nota 2). Depois de construído, o ficheiro deve ser gravado com a terminação *.xyz* por forma a ser aceite pelo programa de visualização como um ficheiro de coordenadas cartesianas.

Apesar de o procedimento adotado fornecer resultados pedagogicamente interessantes considera-se fundamental salvaguardar que o modelo usado é muito simplista e que, na realidade, a adopção, por parte de uma molécula, de uma dada geometria resulta da conjugação de vários factores de complexidade consideravelmente elevada e, sob o ponto de vista teórico, muito além do que é possível abordar ao nível do ensino secundário.

GEOMETRIAS IDEIAS PARA TETRACOORDENAÇÃO

Para este número de coordenação as geometrias estudadas foram a **tetraédrica** (simetria T_d , Figura 1A), de menor valor de R_T (Tabela 1), e a **quadrada plana** (simetria D_{4h} , Figura 1B).

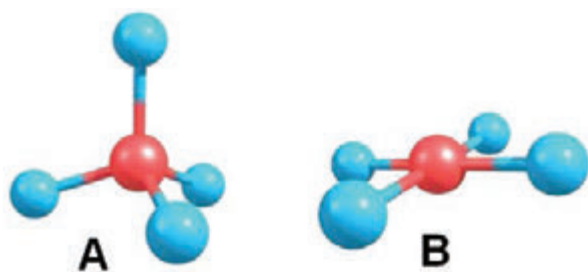


Figura 1 – Duas geometrias de menor valor de R_T para espécies do tipo AB_4

Tabela 1 – Valores de R_T e coordenadas angulares usadas para os átomos periféricos referentes às duas geometrias mais estáveis para espécies do tipo AB_4

R_T	T_d		D_{4h}	
	θ	φ	θ	φ
	0,01669		0,06299	
1	0°	0°	90°	0°
2	109,5°	0°	90°	90°
3	109,5°	120°	90°	180°
4	109,5°	240°	90°	270°

GEOMETRIAS IDEIAS PARA PENTACOORDENAÇÃO

No caso da pentacoordenação as geometrias moleculares estudadas foram a **bipirâmida trigonal** (simetria D_{2h} , Fi-

gura 2A), de valor de R_T ligeiramente mais baixo (Tabela 2), e a **pirâmida quadrada** (simetria C_{4v} , Figura 2B).

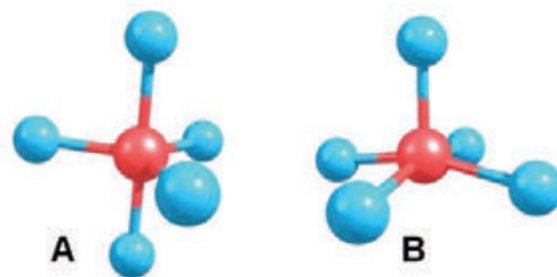


Figura 2 – Duas geometrias de menor valor de R_T para espécies do tipo AB_5

Tabela 2 – Valores de R_T e coordenadas angulares usadas para os átomos periféricos referentes às duas geometrias mais estáveis para espécies do tipo AB_5

R_T	D_{3h}		C_{4v}	
	θ	θ	θ	φ
	0,09811		0,09921	
1	0°	0°	98,8°	0°
2	180°	180°	98,8°	0°
3	90°	90°	98,8°	90°
4	90°	90°	98,8°	180°
5	90°	90°	98,8°	270°

GEOMETRIA IDEAL PARA HEXACOORDENAÇÃO

A geometria molecular de menor valor de R_T (0,1188) para a hexacoordenação é a **octaédrica** (simetria O_h , Figura 3).

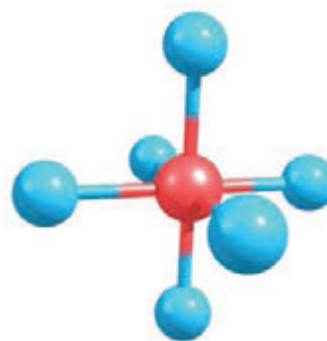


Figura 3 – A geometria de menor valor de R_T para espécies do tipo AB_6

Tabela 3 – Valores de R_T e coordenadas angulares usadas para os átomos periféricos referentes à geometria mais estável para espécies do tipo AB_6

R_T	O_h	
	θ	φ
	0,1882	
1	0°	0°
2	180°	0°
3	90°	0°
4	90°	90°
5	90°	180°
6	90°	270°

GEOMETRIAS IDEAIS PARA HEPTACOORDENAÇÃO

Verificou-se que a geometria molecular ideal com valor de R_T mais baixo (Tabela 4) é a **octaédrica de face “encapada”** (simetria C_{3v} , figura 4 A). Contudo, duas outras geometrias moleculares ideais apresentam valores muito próximos do mínimo: a **prismática de face “encapada”** (simetria C_{2v} , Figura 4B) e a **bipiramidal pentagonal** (simetria D_{5h} , Figura 4 C).

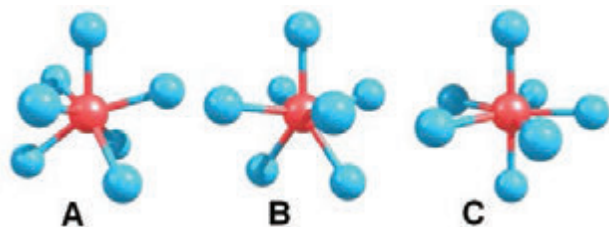


Figura 4 – Três geometrias de menor valor de R_T para espécies do tipo AB_7 .

Tabela 4 – Valores de R_T e coordenadas angulares usadas para os átomos periféricos referentes às três geometrias mais estáveis para espécies do tipo AB_7 .

R_T	C_{3v}		C_{2v}		D_{5h}	
	θ	φ	θ	φ	θ	φ
1	0°	0°	0°	0°	0°	0°
2	74,6°	0°	143,3°	0°	180°	0°
3	74,6°	120°	143,3°	180°	90°	0°
4	74,6°	240°	79,4°	48,7°	90°	72°
5	130,2°	60°	79,4°	131,3°	90°	144°
6	130,2°	180°	79,4°	228,7°	90°	216°
7	130,2°	300°	79,4°	311,3°	90°	288°

GEOMETRIAS IDEAIS PARA OCTACOORDENAÇÃO

Para espécies com oito átomos periféricos a geometria molecular ideal com valor de R_T mais baixo (Tabela 5) e a **anti prismática quadrada** (simetria D_{4d} Figura 5 A). Existem outras duas geometrias moleculares ideais com valores de R_T próximos: a **dodecaédrica** (simetria D_{2d} , Figura 5 B) e a **cúbica** (simetria O_h , Figura 5 C).

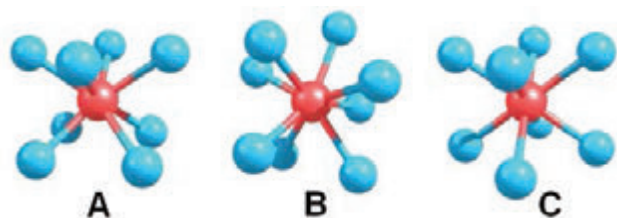


Figura 5 – Três geometrias de menor valor de R_T para espécies do tipo AB_8 .

Tabela 5 – Valores de R_T e coordenadas angulares usadas para os átomos periféricos referentes às três geometrias mais estáveis, para espécies do tipo AB_8 .

R_T	D_{4d}		D_{2d}		O_h	
	θ	φ	θ	φ	θ	φ
1	57,1°	0°	37,3°	0°	54,7°	0°
2	57,1°	90°	37,3°	180°	54,7°	90°
3	57,1°	180°	71,4°	90°	54,7°	180°
4	57,1°	270°	71,4°	270°	54,7°	270°
5	122,9°	45°	108,6°	0°	125,3°	0°
6	122,9°	135°	108,6°	180°	125,3°	90°
7	122,9°	225°	142,7°	90°	125,3°	180°
8	122,9°	315°	142,7°	270°	125,3°	270°

GEOMETRIAS IDEAIS PARA NONACOORDENAÇÃO

Para espécies com nove átomos periféricos a geometria molecular ideal com valor de R_T mais baixo (Tabela 6) é a **prismática triangular de três faces “encapadas”** (simetria D_{3h} Figura 6 A). Existe outra geometria molecular ideal com um valor de R_T próximo: a **anti prismática quadrada de topo “encapado”** (simetria C_{4v} , Figura 6 B).

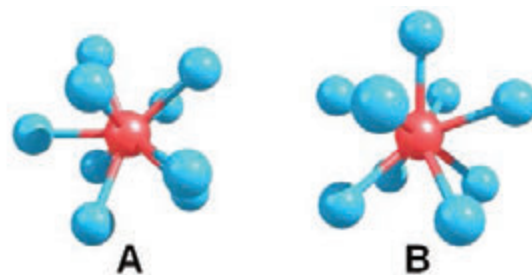


Figura 6 – Duas geometrias de menor valor de R_T para espécies do tipo AB_9 .

Tabela 6 – Valores de R_T e coordenadas angulares usadas para os átomos periféricos referentes às duas geometrias mais estáveis para espécies do tipo AB_9 .

R_T	D_{3h}		C_{4v}	
	θ	φ	θ	φ
1	44,7°	0°	0°	0°
2	44,7°	120°	68,9°	0°
3	44,7°	240°	68,9°	90°
4	90°	60°	68,9°	180°
5	90°	180°	68,9°	270°
6	90°	300°	127°	45°
7	135,3°	0°	127°	135°
8	135,3°	120°	127°	225°
9	135,3°	240°	127°	315°

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos estão de acordo com os publicados para as estruturas ideais [8], demonstrando-se assim, de forma prática e eficaz, que a utilização de meios informáticos facilmente acessíveis, bem como um conhecimento básico de Matemática e de Física permitem a obtenção de dados com interesse em Química.

NOTAS

Nota 1: É possível obter um ficheiro *Excel* já preparado para utilização, em <http://www.spq.pt/boletim/suplementos>.

Nota 2: Exemplo da constituição do ficheiro referente à geometria bipiramidal pentagonal, usando como átomo central o iodo e como átomos periféricos o hidrogénio, para uma hipotética molécula IF_7 :

```
53 0 0 0
9 0,0000 0,0000 1,0000
9 0,0000 0,0000 -1,0000
9 1,0000 0,0000 0,0000
9 0,3090 0,9511 0,0000
9 -0,8090 0,5878 0,0000
9 -0,8090 -0,5878 0,0000
9 0,3090 -0,9511 0,0000
```

BIBLIOGRAFIA

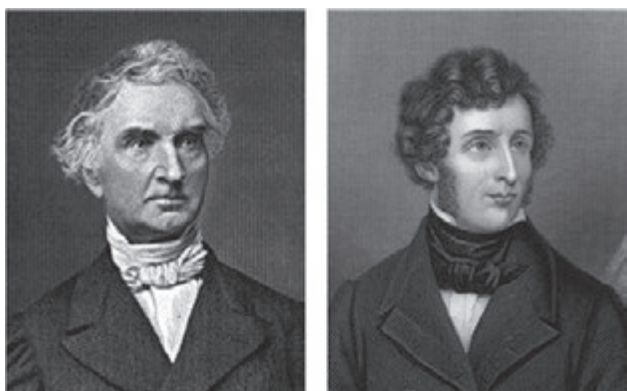
- [1] Programa da disciplina de Física e Química A (níveis 1 e 2) 11.º ou 12.º anos: <http://www.dgicd.min-edu.pt/ensinos-ecundario/> (Ministério da Educação e Ciência, acedido em 07-10-2013)
- [2] A.R. Mahjoub, T. Drews, K. Seppelt, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **31** (1992) 1036-1039
- [3] M.C. Favas e D.L. Kepert, *Prog. Inorg. Chem.* **28** (1981) 309-367
- [4] D.L. Kepert, *Prog. Inorg. Chem.* **25** (1979) 41-144
- [5] D.L. Kepert, *Prog. Inorg. Chem.* **24** (1978) 179-249
- [6] M.G.B. Drew, *Prog. Inorg. Chem.* **23** (1977) 67-210
- [7] <http://www.chemcraftprog.com> (acedido em 07-10-2013)
- [8] D.L. Kepert, "Coordination Numbers and Geometries", in G. Wilkinson, R.D. Gilland e J.A. McCleverty (eds.), "Comprehensive Coordination Chemistry", Vol. 1, Pergamon Press, Oxford (1987) 32-107

ANTIGUIDADES CIENTÍFICAS

A CONTENDA LIEBIG-WÖHLER E O CONCEITO DE ISOMERISMO

A revolução da Química nos finais do séc. XVIII e princípios do séc. XIX foi marcada por rupturas significativas. São disso exemplos o abandono da teoria do flogisto e a introdução da teoria atómica de Dalton. Simultaneamente, com a criação de revistas especializadas e de academias, os resultados científicos passaram a ser divulgados de forma mais rápida e alargada o que, se por um lado, fomentou a troca de ideias, por outro, possibilitou também os desentendimentos públicos.

Nas primeiras décadas do séc. XIX, os químicos Justus Liebig (1803-1873) e Friedrich Wöhler (1800-1882) foram protagonistas de um famoso diferendo que haveria, no entanto, de ter um final feliz [1].



Justus Liebig (esquerda) e Friedrich Wöhler (direita)

Liebig, de origens modestas, começou como aprendiz de farmácia vindo a estudar Química nas Universidades de Bona e de Erlangen. Os bons resultados que obteve vale-

ram-lhe uma bolsa de estudo para Paris, onde frequentou as aulas de prestigiados professores como Louis Jacques Thénard (1777-1857) e Louis Joseph Gay-Lussac (1778-1850). Foi no laboratório deste que se dedicou à análise orgânica, dispondo para o efeito das mais modernas técnicas da época. Interessou-se em particular pelo estudo dos derivados do ácido fulmínico ($H-C=N-O$), com os quais, em tempos – quando era um jovem aprendiz de farmácia – tinha provocado uma explosão [1]. Em 1824 chegou à fórmula do fulminato de prata, que publicou conjuntamente com Gay-Lussac [2].

Wöhler licenciou-se em Medicina em Heidelberg em 1823, apesar de a sua inclinação ser para a Química. Nesta disciplina teve Leopold Gmelin (1778-1853) como professor. Foi este que conseguiu que Wöhler fosse aceite no laboratório de Jacob Berzelius (1779-1848), em Estocolmo. Tal como Liebig em Paris, Wöhler pôde adquirir em Estocolmo uma vasta experiência em Química Analítica. No laboratório de Berzelius analisou o cianato de prata, concluindo que se tratava de um sal de um ácido desconhecido, o ácido ciânico ($H-O-C=N$). Os resultados desta análise quantitativa eram surpreendentemente idênticos aos que Liebig tinha obtido para o fulminato de prata [3].

Liebig, pessoa honesta e bem formada, era todavia detentor de um temperamento algo agressivo e impetuoso que o levou de imediato a acusar Wöhler de não saber fazer análises. Liebig acabaria por analisar uma amostra de cianato de prata que o próprio Wöhler lhe enviou. Os resultados obtidos não deixaram então margem para dúvida: eram

iguais aos de Wöhler [4]. Deste modo, Liebig viu-se obrigado a admitir publicamente a incorrecção de ter posto em causa as capacidades do colega como químico analítico. Foi nestas circunstâncias que acabou por nascer entre os dois químicos uma amizade que duraria até ao fim das suas vidas, bem como uma frutuosa colaboração científica [6].

Os achados de Wöhler e de Liebig criaram um embaraço à época, pois era entendimento geral que dois compostos com propriedades distintas deveriam possuir composições químicas diferentes. A solução para o problema veio de Berzelius, o mestre sueco de Wöhler e um dos maiores químicos do século [6]. De resto, outros factos contribuíram para a racionalização do problema. Em 1825, ao investigar o material oleoso que se obtinha da queima da gordura de baleia para obtenção do gás de iluminação, Michael Faraday (1791-1867), isolou dois produtos: um líquido, o benzeno, e o outro gasoso, com uma composição percentual idêntica à do *gás oleificante* (etileno, C_2H_4), apesar da diferente densidade. Hoje sabe-se que esse gás é o isobutileno (C_4H_8). Em 1822, Berzelius já tinha observado existirem dois óxidos de estanho diferentes com a mesma composição e, em 1828, a ureia que Wöhler sintetizou mostrou ter a mesma composição do cianato de amónio. Em 1823, Eilhard Mitscherlich (1794-1863) observou que os cristais de enxofre apresentavam formas (monoclínica ou rômbrica) que variavam de acordo com o modo de preparação. Também se sabia que a aragonite e a calcite eram duas formas cristalinas do carbonato de cálcio e que tanto a pirite como a marcassite eram FeS_2 . Sabia-se também que o diamante e a grafite eram ambos carbono e por volta de 1826 foi o próprio Berzelius quem descobriu que o ácido tartárico e o *ácido racémico* (racemato do ácido tartárico) tinham a mesma composição, apesar da diferença nalgumas das suas propriedades [1,6]. Assim, em 1831, Berzelius propôs o conceito de *isomerismo* (da palavra grega que significa “partes iguais”), de acordo com o qual compostos isoméricos teriam a mesma composição, contendo igual número absoluto e relativo de átomos mas apresentando propriedades distintas [7]. Disso eram exemplos o fulminato de prata e o cianato de prata. Por sua vez, o gás oleificante e o isobutileno não seriam isómeros já que possuíam o mesmo número relativo de átomos.

Para Berzelius, o isomerismo provinha da possibilidade de os átomos poderem ligar-se de diferentes modos para formar moléculas, o que era perfeitamente concebível à luz da teoria atómica de Dalton. Esta explicação foi bem aceite e - apesar de na época o conceito de massa molar ser ainda vago - o termo *isómero* adquiriu gradualmente o seu significado actual. Em 1841 Berzelius haveria também de introduzir o conceito de *alotropia* para as diferentes variedades de um elemento, enquanto que o conceito de *polimorfismo* era aplicado a compostos que ocorrem em mais do que uma forma cristalina [8].

Como observação final assinala-se que Gay-Lussac tinha já notado em 1814 que a composição percentual do ácido acético e da celulose são idênticas e que “o arranjo dos átomos num composto tem a maior influência no seu carácter neutro, ácido ou alcalino”, abrindo assim, implicitamente, o caminho para a descoberta do isomerismo [9,10].

NOTAS COMPLEMENTARES

Wöhler destacou-se inicialmente em estudos da quinona e da hidroquinona, importantes para o desenvolvimento da Química Orgânica, mas a partir de 1839 centrou-se fundamentalmente na Química Inorgânica. Nesta área deu, entre outros, contributos relevantes para o conhecimento da química do boro, do silício e do fósforo, tendo ainda isolado o berílio e o alumínio [1]. A sua longa carreira académica iniciou-se em 1825 na Escola Politécnica de Berlim, mudando-se posteriormente para a Universidade de Göttingen, onde permaneceu até à morte. Em 1834 foi eleito membro da Academia Real Sueca das Ciências. O seu nome ficou para sempre associado à descoberta da síntese da ureia (1828) pela contribuição decisiva que esta teve para a rejeição da doutrina do vitalismo [11,12].

Leibig teve igualmente uma carreira académica brilhante, iniciada em 1824 na Universidade de Giessen (sob recomendação do famoso navegador Alexander von Humbolt), onde fundou uma escola de ensino e de investigação de grande reputação. Vinte e oito anos depois aceitou um lugar na Universidade de Munique, que ocupou até ao fim da vida. É considerado o “pai” da Química Agrícola, tendo efectuado, entre outros, estudos sobre o nitrogénio como elemento nutriente das plantas e de desenvolvimento de fertilizantes artificiais. Destacou-se também na Química Biológica com a criação de um método de produção de extracto de carne, o qual foi comercializado a partir de 1865. Foi editor da revista *Annalen der Chemie und Pharmacie* e em 1845 recebeu o título de barão. O seu congénial “mau-feitio” fê-lo incompatibilizar-se com vários colegas, entre os quais Louis Pasteur e Jacob Berzelius.

Da grande amizade e da colaboração científica entre Justus Liebig e Friedrich Wöhler ficou um legado de mais de mil cartas que trocaram entre si [1].

REFERÊNCIAS

- [1] S. Esteban, *J. Chem. Educ.* **85** (2008) 1201-1203
- [2] J.L. Gay-Lussac, J. Liebig, *Ann. Chim. Phys.* **25** (1824) 285-311
- [3] F. Wöhler, *Poggendorffs Ann. Phys. Chem.* **1** (1824) 117-124
- [4] J. Liebig, *Schweiggers Jahrbuch der Chemie und Physik.* **18** (1826) 380
- [5] E. Berl, *J. Chem. Educ.* **15** (1938) 553-562
- [6] R. Winderlich, *J. Chem. Educ.* **25** (1948) 501-505
- [7] J. J. Berzelius, *Jahresberichte über die Fortschritte der Physischen Wissenschaften* **10** (1831) 82; **11** (1832) 44
- [8] A. J. Ihde, “The Development of Modern Chemistry”, Harper & Row, Nova Iorque, 1964
- [9] F. Kurzer, *J. Chem. Educ.* **77** (2000) 851-857
- [10] J.L. Gay-Lussac, *Ann. Chim.* **41** (1814) 149
- [11] T. O. Lipman, *J. Chem. Educ.* **41** (1964) 452-458
- [12] W.H. Warren, *J. Chem. Educ.* **5** (1928) 1539-1553

João Paulo André

(jandre@quimica.uminho.pt)

Made in Europe for the World



ChemPubSoc
Europe

2011. Volume 4. 12 Issues
ISSN print 1864-5631
ISSN electronic 1864-564X

ChemSusChem

- brings together the latest developments in chemistry, energy and materials research for a more sustainable future
- publishes Communications, Full Papers, Reviews, Highlights, Book Reviews and more
- is published monthly
- is a sister of *Angewandte Chemie*

 **WILEY**
ONLINE LIBRARY
wileyonlinelibrary.com

Impact Factor[®]:
4.767

[®]2009 Journal Citation Reports[®]
(Thomson Reuters, 2010)



Supported by

ACES

For further information and to subscribe
please send an e-mail to:

cs-journals@wiley.com (Americas, Europe, Middle
East and Africa, Asia Pacific)
service@wiley-vch.de (Germany, Austria, Switzerland)
cs-japan@wiley.com (Japan)

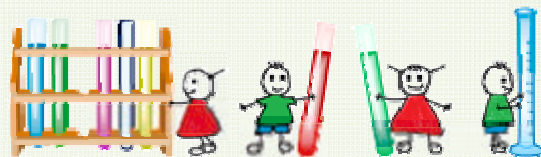
www.chemsuschem.org

 **WILEY-VCH**

Química para os mais novos

Marta C. Corvo

Departamento de Química
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade Nova de Lisboa
marta.corvo@fct.unl.pt



Introdução

Nesta edição que sai em plena época natalícia, vamos dar uma abordagem científica aos enfeites de Natal com um floco de neve especial – na primeira actividade propõe-se fazer a cristalização de boráx no espírito natalício. E porque nesta quadra há um pretexto adicional para trocarmos presentes, vamos também fazer sais de banho perfumados, actividade em que a química de ácido-base volta a ser objecto de estudo.

1- Está a nevar

Atenção: O bórax poderá ser irritante para as mucosas nasais e olhos, o seu manuseamento deverá ser supervisionado por um adulto, numa zona ventilada. O aquecimento da água deverá ser feito por um adulto.

Material:

- Limpa cachimbos*
- Tesoura
- Cordel
- Lápis
- Recipiente de vidro
- Copo medidor
- Colher de sopa
- Água
- Borato de sódio (bórax)**

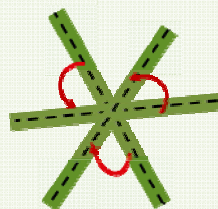
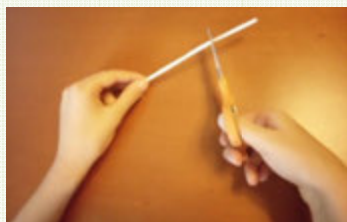


* Encontra-se em tabacarias; ** Encontra-se em farmácias

Procedimento:

1. Preparação do **floco de neve**:
 - a) Cortar um limpa cachimbos em três secções idênticas.
 - b) Torcer as secções duas a duas, no centro formando uma estrela de seis pontas. CUIDADO: o floco de neve tem de caber dentro do recipiente de vidro. Pode fazer-se uma forma de

estrela simples, ou com a mesma técnica que se utilizou para fixar estas secções, introduzir secções menores nas extremidades.



- c) Atar uma extremidade do cordel a uma das pontas do floco de neve, e a outra ao lápis – o comprimento do cordel deve ser tal que o floco fique no centro do recipiente pendurado no lápis, sem tocar em nada.



- Preparação da **solução de boráx** - encher o recipiente de vidro com água acabada de ferver (operação supervisionada por um adulto) e adicionar o bórax (uma colher de cada vez), mexendo sempre. Por cada 250 mL de água adicionar 3 colheres de sopa de bórax.



- Colocar o **floco de neve** dentro da **solução de bórax**, de modo a que o lápis fique no topo do recipiente. O floco deverá ficar completamente submerso sem tocar no fundo do recipiente.
- Esperar que a solução arrefeça, deixando em repouso.
- Passadas 12 horas retirar o floco de neve do recipiente e deixar secar. Está pronto!

Explicação:

Nesta actividade fizemos uma recristalização – solubilizámos o bórax (sólido cristalino) em água quente, e depois à medida que a solução foi arrefecendo voltaram a formar-se cristais. O bórax é mais solúvel na água quente do que na água fria e, como tal, ao arrefecer a solução fica mais saturada e o bórax já não consegue ficar todo dissolvido na água - as moléculas agregam-se e vão precipitando formando cristais (Ver QUÍMICA nº 123, pág. 77-79). O limpa cachimbos serviu de ponto de apoio para a formação dos cristais e por isso ficámos com o nosso floco de neve.



E para o Natal... sais de banho!

Material:

- Bicarbonato de sódio
- Amido de milho
- Ácido cítrico*
- Sulfato de magnésio*
- Óleo de amêndoas doces
- Água
- Óleo ou fragrância para aromatizar
- Corante alimentar
- Tigela grande
- Colher de plástico
- Colheres de medida
- Copos de plástico
- Molde para dar forma aos sais (ex: cuvette de gelo)



- Balança de cozinha
- Tesoura
- Luvas

* Encontra-se em farmácias com manipulação

Procedimento:

1. Utilizando luvas, pesar cada um dos ingredientes secos utilizando um copo de plástico, e adicionar na tigela: 110 g de bicarbonato de sódio; 32 g de amido de milho; 50 g de ácido cítrico e 36 g de sulfato de magnésio.
2. Misturar bem os sólidos com o auxílio de uma colher, tentando desfazer os pedaços maiores.



3. Transferir para um copo de plástico os ingredientes líquidos: 20 mL de óleo de amêndoas doces (4 colheres de chá); 2 mL de água (3/8 colher de chá); 0,6 mL de fragrância (1/8 colher de chá) e 4 gotas de corante alimentar.
4. Misturar bem os ingredientes líquidos com a ajuda de uma colher- forma-se uma emulsão.
5. Adicionar a mistura líquida aos ingredientes sólidos lentamente, misturando com as mãos (sempre com luvas). Poderá haver alguma efervescência - misturar rapidamente com as mãos. A mistura final fica semelhante a areia molhada.



6. Transferir a mistura para o molde pressionando para que fique bem firme.



7. Após 24 horas retirar, com muito cuidado, os sais de banho do molde.
8. Experimentar colocando um cubo de sais dentro de água e observar o que acontece.



Explicação:

Quando se coloca o cubo com os sais dentro de água liberta-se um gás - o dióxido de carbono, que resulta da reacção entre o ácido cítrico que é uma substância ácida, e o bicarbonato de sódio que é uma substância básica (ver QUÍMICA nº 121, pág. 70-71). Uma vez dentro de água, os sólidos começaram a dissolver-se e entraram em contacto um com o outro, dando-se então uma reacção, que se diz de neutralização. Forma-se água e dióxido de carbono, este último como é um gás começa a borbulhar dentro da água, o que ajuda também a espalhar a fragância.

O sulfato de magnésio tem um efeito relaxante, e o amido de milho ajuda a dar forma aos sais, a modelar. Estes sais de banho são efervescentes e devem ser acondicionados num recipiente hermético, para evitar que fiquem com humidade. Pode usar-se óleo de amêndoas doces e fragrâncias ou óleos essenciais de qualidade alimentar, embora já se encontrem disponíveis alguns produtos específicos para este efeito.



Bibliografia

[1] Adaptado de <http://chemistry.about.com/cs/howtos/ht/boraxsnowflake.htm>, acedido em 25/09/2013.

[2] Adaptado de *JCE Classroom Activity (#58): Bath bubblers*, Harris, M. E.; Walker, B. J. *Chem. Educ.* **80** (2003) 1416A.

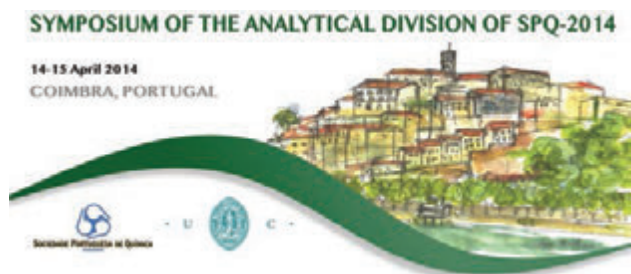
10ª Conferência de Química Inorgânica da SPQ 11 – 12 Abril 2014 na Costa da Caparica

A Divisão de Química Inorgânica da Sociedade Portuguesa de Química vai realizar a 10.ª Conferência de Química Inorgânica da SPQ que irá decorrer na Costa da Caparica, nos dias 11 e 12 de Abril de 2014.

O programa constará de lições plenárias, comunicações orais, comunicações breves (5 min) e de *posters* sobre todos os temas de Química Inorgânica. Serão premiados o melhor *poster* e a melhor apresentação breve.

Terá lugar a atribuição do 2.º Prémio Alberto Romão Dias, instituído pela SPQ em 2009, e atribuído durante a conferência da Divisão de Química Inorgânica. Este prémio é concedido a um químico que, pela obra científica produzida em Portugal, tenha contribuído significativamente para o avanço da Química Inorgânica e Organometálica, em qualquer das suas áreas.

conf.inorganica@chemistry.pt
<http://www.10cqi.eventos.chemistry.pt>



Simpósio SPQ-Analítica-2014 14 – 15 Abril 2014 em Coimbra

O Simpósio SPQ-Analítica-2014 decorrerá entre 14 e de 15 abril de 2014, no Departamento de Química da Universidade de Coimbra. A organização é da Divisão de Química Analítica da Sociedade Portuguesa de Química.

O Simpósio SPQ-Analítica-2014 inclui uma ampla variedade de abordagens académicas que conduzem a uma melhor compreensão de todos os aspectos da área altamente interdisciplinar da Química Analítica. Os temas abordados incluem: metodologias analíticas modernas; electroanálise; validação de métodos; biossensores e bioelectrónica; análise em fluxo; quimiometria; aplicações biotecnológicas.

O programa científico constará de lições plenárias, *keynotes* convidadas, comunicações orais e em painel sobre todos os temas de Química Analítica moderna, com especial ênfase em novos materiais para sensores e detectores e novas técnicas de análise de dados complexos.

Os desafios trazidos pelas novas metodologias analíticas para aplicações ambientais, bem como o desenvolvimento de sensores e novas estratégias de miniaturização em análises alimentares e clínicas serão objecto de discussão.

brett@ci.uc.pt
<http://www.analytical2014.eventos.chemistry.pt>



4th Portuguese Young Chemists Meeting (4PYChem) 29 Abril – 1 Maio 2014 em Coimbra

O Grupo de Jovens Químicos da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e o Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra organizam o 4th Portuguese Young Chemists Meeting (4PYChem) que irá decorrer em Coimbra entre os dias 29 de Abril e 1 de Maio de 2014.

O 4PYChem tem como objectivo principal a difusão do trabalho científico em Química de jovens investigadores em Portugal ou no estrangeiro. Pretende-se também enfatizar a ligação entre a investigação científica fundamental e a sua aplicabilidade na prática industrial, apontando novas oportunidades profissionais e motivando o espírito empreendedor dos participantes. Para além de procurar projectar e aprofundar o interesse pela Química na sociedade, este congresso visa reforçar o desenvolvimento de redes de contacto entre os jovens investigadores, promovendo as suas capacidades de comunicação e de trabalho. Na conferência estarão presentes Aaron Ciechanover, Prémio Nobel da Química em 2004 e Ada Yonath, Prémio Nobel da Química em 2009.

4pychem@chemistry.pt
<http://www.4pychem.eventos.chemistry.pt/>



20th International Symposium on Surfactants in Solution (SIS) 22 – 27 Junho 2014 em Coimbra

Após o simpósio anterior que decorreu em Edmonton (2012), o 20th International Symposium on Surfactants in Solution (SIS) irá ser realizado em Coimbra entre 22 e 27 de Junho de 2014. A conferência SIS irá fornecer o fórum ideal para estimular ideias e estabelecer colaborações, bem como para iniciar discussões frutíferas sobre os mais diversos temas sobre surfactantes e ciência coloidal, que vão desde biocolóides a interfaces nanoestruturadas e de materiais auto-organizados a formulações.

Alguns dos temas a abordar incluem: Adsorção em interfaces; Fenómenos de capilaridade; Tensão interfacial, Reologia interfacial e forças interfaciais; Monocamadas e filmes de Langmuir-Blodgett; Fenómenos electroestáticos e electrocinética; Termodinâmica e cinética de sistemas baseados em surfactante; Solubilização e reactividade em sistemas auto-organizados; Micelas, emulsões e microemulsões; Surfactantes nas ciências da vida, meio ambiente, nano e microtecnologia.

sis2014@qui.uc.pt
<http://www.uc.pt/ctuc/dquimica/sis2014>



Conferência EUCHEM 2014
6 – 11 Julho em Tallin, Estónia

Em 1966, a primeira Conferência EUCHEM em sais fundidos teve lugar na Noruega e a série de conferências continuou a ter lugar nos anos pares até 2004, altura em que se verificou uma mudança no modelo destas conferências. Em 2006, as comunidades de sais fundidos e líquidos iónicos uniram forças pela primeira vez, e a Conferência EUCHEM em sais fundidos foi relançada como Conferência EUCHEM em sais fundidos e líquidos iónicos. Desta forma a EUCHEM 2014 é a 5.^a Conferência em sais fundidos e líquidos iónicos, mas é a 25.^a conferência na série original de reuniões EUCHEM sobre sais fundidos. A conferência decorre entre 6 e 11 de Julho de 2014 em Tallin na Estónia.

A Conferência EUCHEM 2014 em sais fundidos e líquidos iónicos tem como objectivo proporcionar um fórum para discutir o estado da arte da investigação em sais fundidos e líquidos iónicos, e como transferir métodos e técnicas entre os diferentes regimes de temperatura. A conferência também se vai debruçar sobre as perspectivas futuras dos meios iónicos utilizados para fins académicos e industriais.

euchem2014@ttu.ee
<http://www.euchem2014.ttu.ee>



5th European Chemistry Congress (5th EuCheMS)
31 Agosto – 4 Setembro 2014 em Istambul, Turquia

No 5th EuCheMS Chemistry Congress os tópicos considerados serão: Recursos e ambiente (Contaminantes ambientais de preocupação emergente; Qualidade da água e produção de alimentos; Recursos naturais e mineração; Processos oxidativos avançados para tratamento de água; Qualidade do ar); Química e sociedade (Química no contexto cultural - a salvaguarda do passado com responsabilidade para com o futuro; Química no contexto europeu multinacional - educação e comunicação); Materiais (Propriedades, estrutura e síntese de materiais em condições extremas; Nanoquímica; Materiais funcionais; Materiais de Energia; Sólidos macios e polímeros); Síntese e Catálise; Avanços em síntese inorgânica; Síntese de compostos funcionais para aplicações em bioimagem e aplicações relacionadas; Avanços em síntese orgânica; Química para e nas Ciências da Vida (Imaginologia nas ciências da vida; Química biológica e descoberta de fármacos; Os avanços na Química de biomacromoléculas); Compreender a matéria e as reacções (Da biómica à metabolómica e à funcionómica; Bioanalítica para as ciências da vida; Materiais naturais e artificiais nanoestruturados; Avanços em métodos analíticos).

tkd@turchemsoc.org
<http://www.euchems2014.org>

ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

AGREGADOS DE NANOPARTÍCULAS DE OURO NA TERAPIA DO CANCRO

Um grupo de cientistas chineses criou nanopartículas de ouro que respondem às mudanças no pH, agregando-se em condições ácidas. O grupo espera que o seu trabalho contribua para o processo de entrega directa dos fármacos anticancerígenos nos tumores, os quais são mais ácidos que os tecidos sãos, com a vantagem das nanopartículas desenvolvidas permanecerem nas células cancerosas durante mais tempo que outras nanopartículas sensíveis ao pH. Os cientistas da Universidade de Zhejiang, China, prepararam nanopartículas de ouro (AuNPs, 16 nm) revestidas com monocamadas zwitteriónicas auto-montadas que se apresentaram estáveis nas condições de pH do sangue e tecidos sãos mas que se agregaram instantaneamente em resposta ao meio extracelular ácido dos tumores. As AuNPs zwitteriónicas revelaram uma rápida, ultra-sensível e reversível resposta a variações de pH de 7,4 até 6,5. A pH 7,4 mostraram estar bem dispersas e com excelente capacidade de resistir ao ataque por macrófagos. No entanto, a pH 6,5 sofreram rápida agregação sendo absorvidas rapidamente por células cancerosas. Testes *in vivo* mostraram que ao fim de 24 h a quantidade de AuNPs que permanecia no tumor era cerca do dobro da quantidade observada para outras AuNPs revestidas já estudadas por outros grupos. Uma avaliação preliminar da ablação tumoral fototérmica sugere que a agregação de AuNPs pode ser aplicada na terapia fototérmica do cancro. Estes resultados sugerem que a agregação controlada de nanopartículas sensíveis ao microambiente tumoral pode servir como uma estratégia universal para melhorar a retenção e a absorção celular de nanopartículas inorgânicas em tumores. A modificação das nanopartículas com uma superfície zwitteriónica pode proporcionar uma maneira fácil para potenciar essas propriedades de retenção e absorção celular. De acordo com o autor Ji Jian, a sensibilidade das nanopartículas ao pH também abre várias outras possibilidades de investigação uma vez que a existência de um gradiente de pH é uma característica comum quer em tecidos cancerosos quer em tecidos com outras enfermidades ou organelos celulares. Raphaël Lévy, um investigador da Universidade de Liverpool, Reino Unido, referiu que foi notável os autores terem conseguido testes positivos *in vivo* e não apenas testes positivos *in vitro*, que outros grupos haviam já reportado. No entanto, Lévy expressa alguma preocupação uma vez que o facto da retenção ser baseada num processo de agregação, serão necessárias doses elevadas de NPs para que o mecanismo possa funcionar em seres humanos.

(adaptado de “Stealthy nanoparticles gather to take on tumours”, *ACS Nano*, **2013**, DOI: 10.1021/nn402201w; <http://www.rsc.org/chemistryworld/2013/07/nanoparticles-cancer-tumour-ph-delivery>)

Paulo Mendes
(pjgm@uevora.pt)

12 – 17 Janeiro 2014 em Bangalore, Índia

27th International Carbohydrate Symposium (ICS 2014)
 icas@orgchem.iisc.ernet.in
<http://www.ics2014bangalore.in>

11 – 12 Abril 2014 na Costa da Caparica

10.^a Conferência de Química Inorgânica da SPQ
 conf.inorganica@chemistry.pt
<http://www.10cqi.eventos.chemistry.pt>

13 – 16 Abril 2014 em Atenas, Grécia

XII Conference on Optical Chemical Sensors &
 Biosensors (EUROPT(R)ODE XII)
 secretariat@europrode2014.eu
<http://www.europrode2014.eu>

14 – 15 Abril 2014 em Coimbra

Simpósio SPQ-Analítica 2014
 brett@ci.uc.pt
<http://www.analytical2014.eventos.chemistry.pt>

29 Abril – 1 Maio 2014 em Coimbra

4th Portuguese Young Chemists Meeting (4PYChem)
 4pychem@chemistry.pt
<http://www.4pychem.eventos.chemistry.pt/>

10 – 13 Junho 2014 em Timisiora, Roménia

15th International Conference on Polymers and Organic
 Chemistry (POC-2014)
 corneliu.davidescu@chim.upt.ro

11 – 15 Junho 2014 em Malmö, Suécia

15th International Conference on Electroanalysis (ESEAC)
 david@chemsoc.se
<http://www.esec2014.com>

22 – 27 Junho 2014 em Coimbra

20th International Symposium on Surfactants in Solution
 (SIS)
 sis2014@qui.uc.pt
<http://www.uc.pt/fctuc/dquimica/sis2014>

23 – 28 Junho 2014 em Upsala, Suécia

18th International Symposium on Bioluminescence and
 Chemiluminescence (ISBC 2014)
 isbc2014@akademikonferens.uu.se
<http://www.conference.slu.se/isbc2014/>

26 – 30 Junho 2014 em Kharkiv, Ucrânia

Modern Physical Chemistry for Advanced Materials –
 2014 (MPC' 2014)
 beketov2014@karazin.ua
<http://www-chemo.univer.kharkov.ua/beketov2014/>

6 – 11 Julho 2014 em Tallin, Estónia

EUCHEM 2014
 euchem2014@ttu.ee
<http://www.euchem2014.ttu.ee>

6 – 11 Julho 2014 em Trenčianske Teplice, Eslováquia

11th International Conference on Solid State (SSC 2014)

uachmdra@savba.sk
<http://www.ssc2014.sav.sk>

13 – 18 Julho 2014 em Toronto, Canadá

23rd International Conference on Chemistry Education
 (ICCE-23)
 icce2014@chem.utoronto.ca
<http://www.icce2014.org>

13 – 18 Julho 2014 em Bordéus, França

XXVth IUPAC Symposium on Photochemistry
 d.bassani@ism.u-bordeaux1.fr
<http://www.photoiupac2014.fr>

13 – 18 Julho 2014 em Sapporo, Japão

XXVIth International Conference on Organometallic
 Chemistry (ICOMC 2014)
 tamotsu@cat.hokudai.ac.jp
<http://www.ec-pro.co.jp/icomc2014/>

10 – 14 Agosto 2014 em S. Francisco, EUA

13th IUPAC International Congress of Pesticide Chemistry
 kracke@dow.com
<http://www.iupac2014.org>

10 – 15 Agosto 2014 em Otava, Canadá

22nd International Conference on Physical Organic
 Chemistry (ICPOC-22)
 pmmayer@uottawa.ca
<http://www.events.sciences.uottawa/ICPOC22/welcome.html>

24 – 28 Agosto 2014 em Praga, República Checa

XVth International Meeting on Boron Chemistry (IME
 Boron XV)
 gruner@iic.cas.cz
<http://www.imeboronxv.cz>

31 Agosto – 4 Setembro 2014 em Istambul, Turquia

5th EuCheMS Chemistry Congress
 tkd@turchemsoc.org
<http://www.euchems2014.org>

7 – 11 Setembro 2014 em Lisboa

EFMC-ISMIC 2014 - 23rd International Symposium on
 Medicinal Chemistry
 info@LDOrganisation.com
http://www.ldorganisation.com/v2/produits.php?langue=english&clic_menu=1238915495

14 – 17 Outubro 2014 em Lima, Perú

31.^o Congreso Latinoamericano de Química (CLAQ-
 -2014) / XXVII Congreso Peruano de Química
 claq2014@gmail.com
<http://www.claq2014.blogspot.pt>

9 – 14 Agosto 2015 em Busan, Coreia

IUPAC 2015 45th World Chemistry Congress
 office@iupac2015.org
<http://www.iupac2015.org/>



AREA DE SOCIO
 email password
[NOVO USUÁRIO](#) [RECUPERAR PASSWORD](#)



XII ENCONTRO DE QUÍMICA DOS ALIMENTOS

XII ENCONTRO DE QUÍMICA DOS ALIMENTOS

Organizado pela Divisão de Química dos Alimentos da SPQ e a realizar no Instituto Superior de Agronomia, de 10 a 12 de Setembro de 2014



OLIMPIADAS DE QUÍMICA
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA
2014

OLIMPIADAS DE QUÍMICA: EDIÇÃO 2014

As inscrições estão abertas até dia 31 de janeiro de 2014



20th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SURFACTANTS IN SOLUTION

Temos o prazer de informar que a inscrição e a submissão de resumos para o Simpósio já estão abertas.



PRÓXIMOS CONGRESSOS

- 01/12/2013 a 03/12/2013
8º Encontro Nacional de Cromatografia
- 01/04/2014 a 12/04/2014
10ª Conferência de Química Inorgânica da SPQ
- 14/04/2014 a 15/04/2014
Simpósio SPQ-Análítica-2014

PERIÓDICOS DE QUÍMICA



Visite o novo site da SPQ



2014 Grand Prix

Fondation de la Maison de la Chimie

20th GRAND PRIX OF THE FONDATION DE LA MAISON DE LA CHIMIE

Estão abertas candidaturas GRAND PRIX que premeia uma obra original, envolvendo a química, em benefício da vida, do homem, da sociedade ou da natureza



PRÉMIO REN
2013
REGULAMENTO

PRÉMIO REN-2013

Este prémio visa distinguir as melhores teses de mestrado, concluídas e classificadas nos anos letivos de 2011/2012 e 2012/2013.



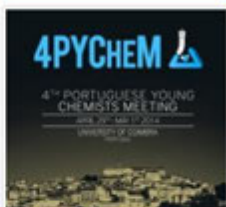
SOCIEDADE PORTUGUESA de Química

POSIÇÃO DA SPQ SOBRE AS NOVAS METAS CURRICULARES E NOVOS PROGRAMAS DA DISCIPLINA DE FÍSICO-QUÍMICA (DO 1º ANO) E DE QUÍMICA (2º ANO)

Comunicado Oficial



www.spq.pt



4PYCHEM

4th PORTUGUESE YOUNG CHEMISTS MEETING

4º PYCHEM irá decorrer na cidade de Coimbra nos dias 29, 30 de Abril e 1 de Maio de 2014



SIMPÓSIO SPQ-ANALÍTICA 2014

O Simpósio SPQ-Análítica-2014 terá lugar de 14-15 de Abril de 2014, no Departamento de Química da Universidade de Coimbra.



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

Neste Boletim publicam-se entrevistas, reportagens, artigos solicitados e propostos, noticiário, resenhas de livros e outras publicações e correspondência dos leitores. É incentivada a submissão voluntária de manuscritos de carácter relativamente geral e escritos de modo a despertar interesse a um vasto leque de leitores.

O *QUÍMICA*, embora não sendo especializado na História e Filosofia da Química, encoraja a submissão de contribuições nesta área, podendo também incluir artigos de autores especialmente convidados para publicarem sobre temas específicos deste domínio.

NORMAS DE COLABORAÇÃO E INSTRUÇÕES PARA OS AUTORES

- Os manuscritos devem ser enviados por correio electrónico, para o endereço bquimica@quimica.uminho.pt, dirigidos ao Editor do *QUÍMICA*. O material submetido deverá conter o seguinte:
 - Um arquivo **MS Word** com as figuras e tabelas incorporadas. O texto deve ser escrito com espaçamento duplo. Tabelas, gráficos e ilustrações devem ser numerados e incorporados com as respectivas legendas descrevendo sumariamente o seu conteúdo. As citações longas devem ficar destacadas no texto; as curtas devem ser colocadas entre aspas.
 - Um arquivo adicional devidamente identificado, por cada gráfico ou ilustração, em formato **JPEG** ou **TIFF**, com a resolução adequada a uma boa reprodução gráfica no tamanho original.
- Os manuscritos devem conter um resumo de 50 a 200 palavras com a descrição do respectivo conteúdo. Salvo casos excepcionais, os textos não devem exceder cerca de 30 000 caracteres (5 a 6 páginas da revista, incluindo as figuras).
- Os manuscritos devem seguir, tanto quanto possível, as recomendações da IUPAC quanto à nomenclatura e unidades.
- As referências devem ser numeradas sequencialmente à medida que sejam citadas ao longo do texto e indicadas por um número colocado entre parênteses rectos (por exemplo: [1] ou [2,3] ou [4-8]). As referências devem ser compiladas no fim do texto, obedecendo aos seguintes formatos:

Livros:

- [1] S.J. Formosinho, "Fundamentos de Cinética Química", Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1982
- [2] R.S. Turner, *University Reformers and Professional Scholarship in Germany, 1760-1806*, in L. Stone (ed.), "The University in Society", Princeton University Press, Princeton, 1974, 495-531
- [3] R.S. Turner, *op. cit.*, 496-497

Publicações Periódicas:

- [4] G. Krager, *Nachr. Chem.* **53** (2005) 136-138
- [5] A.N.L. Lopes, J.G. Ferreira, *Anal. Biochem.* **342** (2005) 195-197

Fontes Manuscritas:

As fontes manuscritas devem conter todas as informações necessárias que permitam a sua localização; referências posteriores devem citar nome, data e abreviatura da fonte, caixa, número da página ou fólio:

- [6] Carta de Adolphe Wurtz a Jean-Baptiste Dumas, 15 de Fevereiro de 1864, Paris, Archives de l'Académie des Sciences, Dossier Wurtz.

Endereços Electrónicos:

A utilização de endereços electrónicos deve ser evitada e limitada a fontes institucionais fidedignas; deve conter o endereço completo, de modo a permitir a localização da fonte, e a data de acesso.

- [7] SDBS Web: <http://www.aist.go.jp/RIODDB/SDBS> (*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology*, acedido em 01-01-2006).

- Os agradecimentos devem ser colocados no fim dos artigos, antes das referências.
- O corpo editorial acusará a recepção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores. Com base nas apreciações obtidas, será decidida a aceitação, a recusa ou eventualmente a revisão dos textos pelos autores antes de ser tomada uma decisão definitiva.
- Em casos especiais, sujeitos à concordância da Comissão Editorial do *QUÍMICA*, as contribuições poderão ser publicadas em inglês, ou noutra língua estrangeira, devendo então conter um resumo suplementar em português.
- Os manuscritos submetidos para publicação no *QUÍMICA* não podem ser submetidos a outras revistas. A reprodução de figuras já publicadas carece da devida autorização pelo detentor dos direitos. A autorização para reproduzir imagens é inteiramente da responsabilidade do autor, o que deverá ser referido nos casos em que se aplique.
- Os direitos de autor dos artigos publicados são propriedade da Sociedade Portuguesa de Química, não se autorizando a sua reprodução total ou parcial, mesmo sob a forma de tradução numa língua diferente, salvo com autorização escrita da Comissão Editorial.
- No caso dos autores desejarem corrigir as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente aquando da submissão do manuscrito.
- As provas tipográficas dos artigos em co-autoria, bem como as separatas, serão enviadas para o autor responsável, a menos que o Editor seja informado do contrário.
- A inobservância de qualquer das normas de colaboração poderá levar à devolução do texto recebido.

CONTACTOS:

Editor do *Química* - Boletim da Sociedade Portuguesa de Química: **JOÃO PAULO ANDRÉ**
Departamento de Química - Universidade do Minho - 4710-057 Braga
Tel.: 253 604 385 - E-mail: bquimica@quimica.uminho.pt