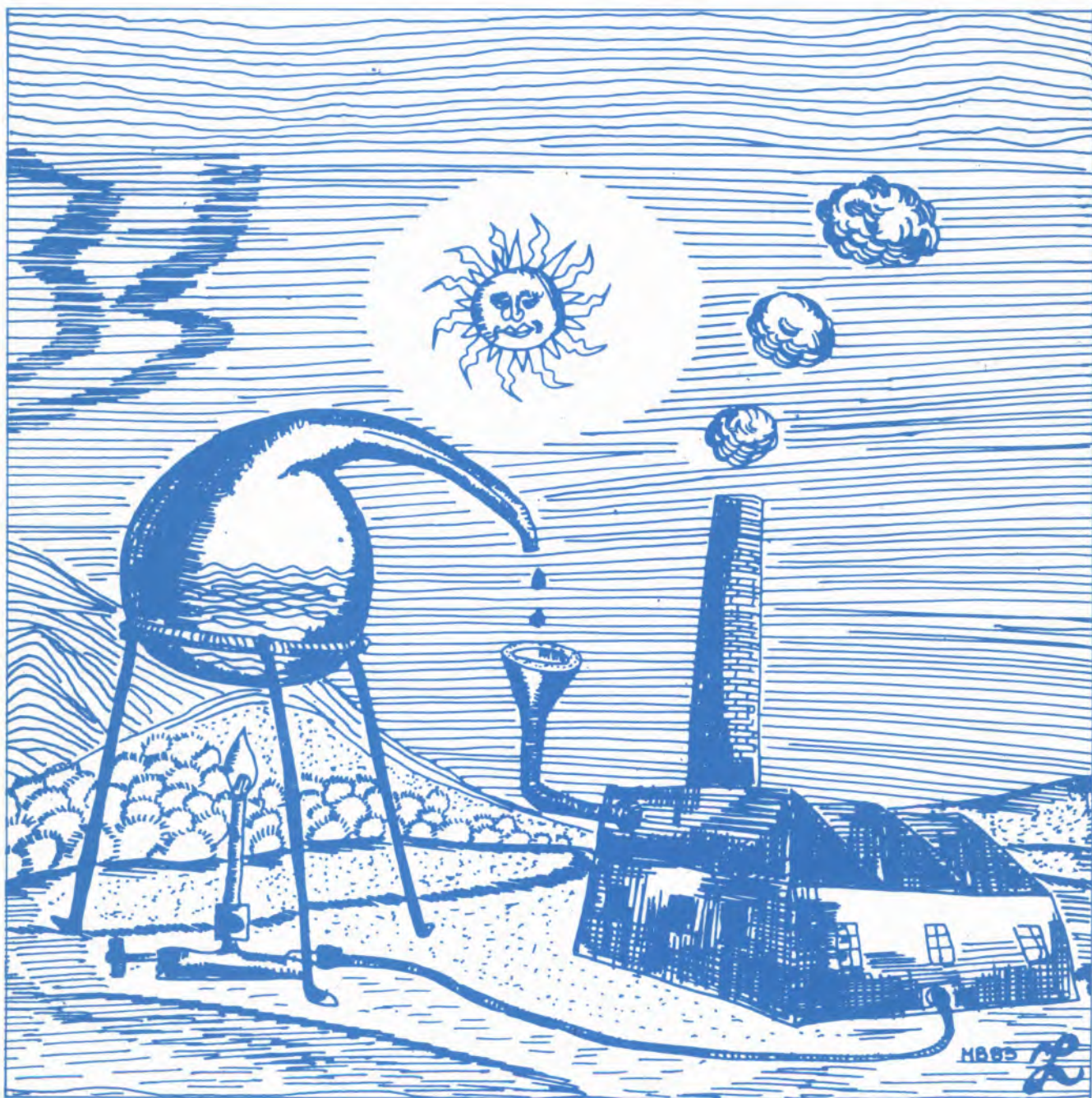


boletim

SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE
QUIMICA



Publicação Trimestral • N.º 41 (Série II) • Setembro 1990



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



CORPOS GERENTES

Presidente – **A. Romão Dias**
 Vice-Presidente – **J. Luís Figueiredo**
 Secretário-Geral – **C. Nieto Castro**
 Secretários-Gerais Adjuntos
 – **Luísa Maria Abrantes** e **Fernando Jorge Pina**
 Tesoureiro – **Luís Paulo Rebelo**

Conselho Fiscal

Presidente – **Vitor Lobo**
 Vice-Presidente – **Inês Florêncio**
 Relator – **António Palavra**

Mesa da Assembleia Geral

Presidente – **Maria Alzira Ferreira**
 1º Secretário – **Maria Teresa Barros**
 2º Secretário – **João Rui Guedes de Carvalho**

ASSEMBLEIAS REGIONAIS

DELEGAÇÃO DO NORTE (Sede no Porto)

Assembleia Regional

Presidente – **João Cabral**
 1º Secretário – **Raul Barroca**
 2º Secretário – **José Luís C. Figueiredo**

Direcção da Delegação Regional

Presidente – **José Luís Figueiredo**
 Secretário – **Manuel Ribeiro da Silva**
 Vogal – **José Luís Costa Lima**

DELEGAÇÃO DO CENTRO (Sede em Coimbra)

Assembleia Regional

Presidente – **A. J. Andrade de Gouveia**
 1º Secretário – **F. Pinto Coelho**
 2º Secretário – **Júlio A. M. Cunha Pinto**

Direcção da Delegação Regional

Presidente – **A. J. Campos Varandas**
 Secretário – **Carlos F. G. Gerales**
 Vogal – **Júlio P. de Jesus**

DELEGAÇÃO DO SUL (Sede em Lisboa)

Assembleia Regional

Presidente – **Ana Lobo**
 1º Secretário – **Filomena Camões**
 2º Secretário – **Maria da Graça Correia**

Direcção da Delegação Regional

Presidente – **Romão Dias**
 Secretário – **José Costa Reis**
 Vogal – **Maria Helena Pereira**

EXECUÇÃO GRÁFICA – FNAC Gráfica, SA
 Rua D. Carlos Mascarenhas, 39 – 1000 Lisboa
 Telef. 68 77 28 • 69 09 54 • Telefax 69 09 61

boletim

Propriedade e edição da Soc. Port. de Química

Director:

RAQUEL GONÇALVES (FCL)

Directores Adjuntos:

ANA SIMÕES (INIC)
 ANTÓNIO CALADO (FFL)
 LÍDIA ALBUQUERQUE (FCL)
 MANUEL GIL (EDP)

Redacção e Administração

Sociedade Portuguesa de Química
 Av. da República, 37 - 4º
 1000 LISBOA – Tel. 793 46 37

(Horário de expediente:
 de 2ª a 6ª feira, das 9 às 13 e das 14 às 17 horas)

SECÇÕES TEMÁTICAS:

Informações, actualidade

Filomena Martins (FCL)

Educação em Química

Elisa Maia (FCL)
 Isabel Pinheiro Martins (Univ. Aveiro)

Química e Indústria

António Gonçalves da Silva (SONADEL)
 João Moura Bordado (HOECHST)

Evolução Química

Hernâni Maia (Univ. Minho)
 Joaquim Moura Ramos (IST)

Segurança nos Laboratórios

Maria João Marcelo Curto (LNETI)

Química e Saúde

Eduarda Rosa (FFL)

Computadores em Química

Fernando Fernandes (FCL)
 Filomena Freitas (FCL)

História da Química

António Amorim Costa (Univ. Coimbra)
 António Manuel Nunes dos Santos (Univ. Nova Lisboa)

Congressos e Conferências

Maria Regina Tavares (LNETI)

Publicidade

CRISTINA SILVA MACÁRIO
 Sociedade Portuguesa de Química
 Av. da República, 37 - 4º
 1000 LISBOA – Tel. 793 46 37

Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores e as opiniões neles defendidas não envolvem as direcções do Boletim e da Sociedade Portuguesa de Química.

Boletim da Sociedade Portuguesa de Química

N.º 41 (Série II) • Setembro 1990

SUMÁRIO

• Informações, actualidade	3
• Pequena Crónica Arqueológica, <i>Pierre Laszlo</i>	7
• O Modelo de Resolução de Problemas como Investigação – sua aplicação à Química, <i>Vicente Reyes Martín e Carlos J. Furió Mas</i>	11
• Trabalho Experimental – a construção de fichas experimentais, <i>Mariana P. Pereira</i>	17
• Partícula na Caixa – um programa didáctico do modelo da partícula em poço de potencial para microcomputadores da família Apple II, <i>Alexandre L. Magalhães e J. A. N. F. Gomes</i>	23
• Deposição Electroless, <i>J. P. Correia, A. P. Ricardo e L. M. Abrantes</i>	27
• Surpresas da Condensação de Michael, <i>Ana Paula Pereira Paiva</i>	31
• Interação de Iões Tiocianato e Perclorato em Meio Ácido, <i>M. Madalena Humanes e António Negrão</i>	37
• Um Curso Prático de Cinética Química – 3. Análises de correlação: efeito de solvente, <i>Lídia M. P. C. Albuquerque e Raquel M. C. Gonçalves</i>	41
• Divulgação Científica em Portugal – uma resenha bibliográfica, <i>Carlos Fiolhais</i>	47
• Congressos e Conferências	55

BIBLIOTECA DE PROGRAMAS

A secção temática **COMPUTADORES EM QUÍMICA** está a organizar uma **BIBLIOTECA DE PROGRAMAS**.

Os programas (em disquetes de 5.25") poderão ser adquiridos mediante o envio de um cheque de 500\$00 (para pagamento da disquete e portes de Correio) dirigido à Sociedade Portuguesa de Química.

PROGRAMAS DISPONÍVEIS:

- 1 – Simulação de uma Curva de Titulação
Ácido Fraco – Base Forte
(descrição no Bol. Soc. Port. Quím., 1985, **22**, 67)
- 2 – Determinação Computacional da Temperatura Crítica Superior de Solução de uma Mistura Líquida Binária
(descrição no Bol. Soc. Port. Quím., 1988, **34**, 19)
- 3 – Determinação Computacional de Funções Termodinâmicas de Activação a partir da Equação de Everett e Wynne-Jones
(descrição no Bol. Soc. Port. Quím., **34**, 19)
- 4 – Um Programa de Cálculo do Modelo de Hückel em Microcomputador
(descrição no Bol. Soc. Port. Quím., 1986; **33**, 26;
dispomos de versões para os micros Apple IIe e Apple IIc e encontra-se já em preparação uma versão destinada a ser utilizada com MS-DOS)
- 5 – Partícula na Caixa
(descrição neste número;
dispomos de uma versão para os micros Apple II e Apple IIc, com instruções de utilização)

Informações, actualidade *

Substituição dos CFC

Os clorofluorcarbonetos (CFC) utilizados como propulsores em aerossóis ou como refrigerantes são, como se sabe, acusados da destruição da camada de ozono estratosférica, a qual protege o planeta das radiações U.V.

Em 1987, 33 países assinaram o Protocolo de Montréal, prevendo uma redução para metade da produção e consumo daqueles produtos. No entanto, a partir da decisão da Comunidade Europeia para eliminar completamente o uso de CFC até ao ano 2000, verificam-se movimentos nos grandes produtores com vista à sua substituição.

O grupo ATOCHEM – 2º produtor mundial de CFC – lançou-se agora na produção dos hidrofluorcarbonetos (HFC), considerados como os melhores substituintes para isolamentos e refrigerantes. No entanto, os novos produtos, embora envolvendo um processo de fabrico mais dispendioso, são passíveis de reciclagem. Os HFC não têm as mesmas propriedades físico-químicas que os CFC e portanto, não poderão substituí-los em todas as suas aplicações – até ao momento conseguiu-se uma taxa de substituição na ordem dos 40%. Por outro lado, é certo que o desenvolvimento industrial no fabrico de hidrofluorcarbonetos permitirá baixar consideravelmente o teor em cloro na estratosfera, o que é, por si só, uma enorme vantagem.

Resta esperar agora pelos últimos testes toxicológicos (em curso) para que as unidades industriais vejam aprovados os seus projectos de fabrico do novo produto.

Adaptado de "La Recherche", Junho 1990

Alumínio: Um "novo" recurso energético

Investigadores da Universidade Pierre e Marie Curie, em França e do Instituto Paul Scherrer, na Suíça, propõem a utilização do alumínio para, alternadamente, armazenar e produzir energia eléctrica, à escala industrial. A ideia remonta pelo menos aos anos 60, mas o projecto foi então abandonado devido à incapacidade de ultrapassar os problemas tecnológicos surgidos.

O objectivo principal é o de produzir alumínio nos períodos de excesso de produção de energia eléctrica (não obrigando portanto à redução da capacidade de produção de energia), e converter depois a energia química em energia eléctrica nos períodos em que a necessidade de corrente eléctrica é maior. De acordo com os resultados já obtidos, uma pilha composta

por cubos de alumínio, com 25m de lado, representa *teoricamente*, uma energia recuperável de 350 GW/hora, ou seja uma quantidade de energia suficiente para assegurar o consumo total de energia de um país como a Suíça durante 2 ou 3 dias.

Os protótipos industriais desenvolvidos desde 1986 consistem em células de alumínio-oxigénio, e o problema mais difícil de enfrentar é a formação de uma película superficial isolante de óxido de alumínio. Para ultrapassar este problema é necessário produzir ligas de alumínio e outros metais do mesmo grupo de forma a tornar condutora a película de óxido. As ligas desenvolvidas recentemente permitem já obter um rendimento energético da ordem dos 70%.

Entretanto, a procura de pequenas e médias aplicações para células deste tipo levou já à criação de um protótipo destinado aos automóveis movidos a corrente eléctrica (cuja produção em pequenas séries foi já iniciada nos EUA, mas com outro tipo de baterias).

Outros investigadores dirigiram as suas pesquisas no sentido do desenvolvimento de células de alumínio-cloro, com o fito de obter rendimentos ainda maiores. Em qualquer dos casos prevê-se que se os pesquisadores descobrirem as respostas certas para os problemas que ainda subsistem, a indústria de alumínio conhecerá uma nova revolução.

Adaptado do jornal "Expresso", 30 de Junho 1990

Protecção de superfícies

A Whatman Scientific acaba de lançar o seu "último grito" em protecção de superfícies para trabalho laboratorial – o Benchkote Plus. Este novo material capaz de absorver 0.75l de água por m², consiste numa superfície de papel absorvente, laminada por uma forte camada de polietileno. O lado do papel absorve rapidamente qualquer grande volume de líquido derramado, enquanto o de polietileno contém o derramamento, evitando que ele atinja a superfície imediatamente abaixo. Este produto, além de oferecer absorção máxima, pode ser igualmente usado para almofadar e proteger material de laboratório delicado, do efeito de choques acidentais.

* Colaboram neste número Cristina Ventura, Filomena Freitas, Filomena Martins e Ruben Leitão.

Geólogos amadores descobrem novo zeólito

A Geologia é uma actividade de lazer popular nos EUA e, embora normalmente, as descobertas dos entusiastas amadores sejam apenas bonitos achados para os seus possuidores, por vezes, fazem-se achados verdadeiramente excepcionais. Um grupo de 18 "caçadores de rochas" descobriu recentemente um novo zeólito, agora denominado *boggsite*, ao procurar, num grande buraco perto do rio Columbia (EUA, estado de Washington) um outro zeólito que havia sido descoberto por um dos membros do grupo – um funcionário dos correios – há cerca de dois anos.

O novo zeólito suscitou especial interesse devido à sua estrutura e propriedades. Recorde-se que os zeólitos, aluminosilicatos de metais alcalinos e alcalino-terrosos, são constituídos por unidades tetraédricas – Si e Al rodeados por 4 átomos de oxigénio – que formam cavidades poliédricas e redes com canais mais ou menos ramificados contendo os iões metálicos. A sua composição e estrutura torna-os extremamente reactivos e permite que sejam utilizados como catalisadores em inúmeros processos industriais dos quais se destaca o "cracking" do petróleo.

A maior limitação destes compostos é a estreiteza dos seus canais que, na maior parte dos zeólitos mais úteis, são baseados em anéis com dez membros. A faujasite, que tem anéis de 12 membros, apesar de potencialmente útil é um mineral raro e, em geral, os zeólitos sintéticos têm apenas anéis de 10 membros. É aqui que radica a importância da recém-chegada *boggsite*, pois além de possuir uma superfície com grandes microporos e ser composta por canais tridimensionais formados a partir de anéis de 10 e 12 membros, é extremamente estável a altas temperaturas.

Pensa-se que a quantidade deste mineral existente na natureza seja insuficiente para assegurar o seu aproveitamento comercial, mas os cientistas estão convencidos de que será possível reproduzi-lo laboratorialmente.

Adaptado de "Science", 247, Março 1990

Embalagens novas

Na indústria alimentar cada vez mais os alimentos são conservados dentro de embalagens em atmosfera neutra (azoto ou gás carbónico). A ausência de oxigénio (i.e., teor inferior a 1%) na embalagem, garante a boa conservação dos produtos mas, infelizmente, por tempo limitado. Apesar de todas as vantagens das embalagens plásticas, a impermeabilidade não é total e, depois de algum tempo, a taxa de oxigénio que se encontra no interior é suficiente para a deterioração do produto.

Uma solução proposta pela MITSUBISHI – Japão, há já alguns anos e recentemente adoptada pela sociedade francesa STANDA é a de colocar no interior da embalagem um "absorvente de oxigénio". Trata-se de um sal de ferro divalente que por oxidação produz o sal férrico correspondente. Este processo, porque consome o oxigénio "livre", contribui para a boa manutenção do produto. No entanto, apresenta-se um problema: torna-se imperativo que o sal ferroso não contacte com os alimentos.

De forma a contornar a dificuldade, um outro sistema foi agora proposto pela CBM-Packaging. Este, é fundado sobre o mesmo princípio: oxidação de um sal divalente a trivalente, mas aqui o elemento absorvente é misturado com o material plástico formando-se um filme de protecção. A matéria plástica constitui uma barreira física à qual se junta a barreira química, formada pelo sal de cobalto, à passagem do oxigénio para o interior da embalagem.

O único problema encontrado até ao momento para o novo projecto parece ser o delicado equilíbrio qualidade/preço.

Adaptado de "La Recherche", Junho 1990

Miljøforskning: Investigação sobre o ambiente

Tudo tem um preço e o preço do alto desenvolvimento da produção industrial é a contaminação ou poluição da Terra, do Ar e da Água.

Mas não sejamos pessimistas ou alarmistas nem criemos sentimentos de culpa em relação a este problema. As potencialidades do homem são ilimitadas. A consciência da importância do ambiente é tão grande em todo o mundo, que temos de acreditar que os mesmos homens que contribuíram ou continuam ainda a contribuir para a destruição ecológica do nosso planeta, serão os mesmos que ajudarão também a despoluí-lo.

O problema da poluição não é um problema local ou nacional, mas um problema mundial. A poluição espalha-se através dos ventos e correntes marítimas, afectando animais e plantas. A sociedade actual defronta-se com uma série de problemas que poderão vir a afectar seriamente o nosso planeta num futuro próximo. Todos, de forma activa, devemos ser devidamente informados para agir individualmente e em grupo para prevenir e remediar esses problemas de uma forma consciente e sem culpabilizações.

Porque o Ambiente é simultaneamente uma fonte de recursos e de prazer para o Homem, é necessário desfrutá-lo nos dois sentidos sem que nenhum deles afecte o outro.

Parece ser este um dos principais dilemas da educação ambiental.

Segundo Hines e Hungford (1984, "... acções responsáveis significam comportamentos com o objectivo de atingir e/ou manter um equilíbrio dinâmico entre a qualidade de vida e a qualidade do ambiente. Desenvolver cidadãos educados para que sejam capazes de, e tenham uma vontade consciente de agirem na preservação e respeito pelo ambiente, é o objectivo último da educação ambiental".

Uma educação ambiental que, reconhecendo a existência de forças sociais para exercer as influências necessárias, se possa aperceber da sua responsabilidade social e transformá-la em acções adequadas.

O Instituto de Investigação de Risø em Roskilde, Dinamarca, ligado ao Instituto Nacional de Investigação Científica Niels Bohr, é uma instituição vocacionada para a investigação científica aplicada em todas as áreas da Ciência e da Técnica. As duas grandes áreas de investigação são a Energia e o Ambiente.

Existe uma grande ligação entre estas duas áreas uma vez que a maior parte da poluição provém da produção de energia e processos industriais de fabrico.



Esta revista apresenta alguns dos factores poluidores que afectam o ar, os mares e oceanos, a terra e a água e como este Instituto, realiza investigação sobre a diminuição desses factores e a sua prevenção.

Anabela Martins

Teoria dos números

A teoria dos números tem a reputação de não ter qualquer utilidade – o que é totalmente injustificado. O último exemplo chega-nos do investigador da Universidade de Ciência e Tecnologia de Pequim - China, que encontrou uma nova "fórmula de inversão", a qual generaliza uma relação estabelecida no século passado pelo matemático alemão Mobius (N.X. Chen, Phys. Rev. Lett., **64**, 1193, 1990).

O que é a fórmula de Mobius? Tomemos uma função de n^{os} inteiros positivos $f(n)$ – e construa-se a partir dela uma nova função $F(n)$, dada pela soma dos divisores de n :

$$F(n) = f(d_1) + f(d_2) + f(d_3) + \dots$$

A fórmula de inversão de Mobius é uma fórmula simples que permite estabelecer a função $f(n)$ a partir de $F(n)$.

N.X. Chen obteve agora uma generalização desta fórmula, onde n pode ser qualquer n^{o} , permitindo assim a aplicação a problemas físicos cujo estudo passa pela inversão de funções. O autor utilizou já a sua relação na determinação da distribuição da temperatura de um corpo negro. Mas mais prometedora foi a relação obtida por Chen que permite determinar o espectro de frequências de vibração de um sólido cristalino se se conhecer o seu calor específico em função da temperatura.

É de esperar agora inúmeras outras aplicações físicas que com o recurso a esta nova técnica matemática, resultarão mais esclarecedoras de outros tantos fenómenos.

Adaptado de "La Recherche", Junho 1990

Um novo padrão de temperatura

A medição da temperatura é algo que a maioria dos investigadores toma como garantido, mas, se é verdade que na maior parte das situações dispomos de termómetros rigorosos, não o é menos que a determinação de temperaturas perto do zero absoluto é um assunto bem mais complicado. Realmente, é tão difícil medir exactamente temperaturas extremamente baixas que, até este ano, o padrão internacional de temperaturas só ia até aos 13,81 K. Este padrão de temperaturas é extremamente usado nos laboratórios oficiais de cada país para calibrar os seus próprios termómetros, mas até Janeiro deste ano não havia acordo sobre a melhor forma de lidar com temperaturas abaixo de 13,81 K. No início do corrente ano foi publicada uma nova escala internacional de temperaturas, a ITS-90, que vai até aos 0,65 K, e sabe-se que com o rápido desenvolvimento da termometria de baixas temperaturas será possível atingir num futuro próximo os 0,01 K (!).

O padrão ITS-90 foi desenvolvido pelo "Bureau de Poids et Mesures", uma organização internacional sediada em França, e substitui o anterior padrão que datava de 1968; além de ser mais preciso, a diferença mais relevante é o abaixamento espectacular do seu limite inferior. Este facto deveu-se ao desenvolvimento de pelo menos três novas técnicas para a medição de temperatura que permitirão atingir os 0,01 K, valor considerado limite pelos especialistas em termometria. O novo padrão é mais preciso que o de 1968 devido à substituição dos termopares anteriormente utilizados por um termómetro de resistência de platina entre os 13,8033 e os 1234,93 K. Acima deste limite a temperatura de um corpo é determinada a partir da frequência e intensidade da radiação por ele emitida.

Além de definir termómetros, o ITS-90 proporciona também "pontos fixos" para a sua calibração; por exemplo, o ponto triplo da água é usado (como já acontecia) para definir o ponto 273,16 K, ou o 0 °C. Outros pontos fixos são também definidos, tais como o do hidrogénio a 12,8033 K, o ponto triplo do néon a 24,5561 K, e o ponto de fusão da prata a 1234,93 K.

O ITS-90 fornece ainda fórmulas para a interpolação entre os pontos de referência dado que, por exemplo, a variação da resistência da platina com a temperatura não é exactamente linear.

Adaptado de "Science", **247**, Março 1990

Symposium on Membrane Lipids

A S.P.Q. recebeu com agrado a informação de que o Instituto de Bioquímica apresentou recentemente a publicação do "Symposium on Membrane Lipids" (em Actas de Bioquímica, vol. 2, 1989) que pode ser adquirida por quem o desejar.



O Ex-libris para a Universidade de Lisboa

Conquanto não seja possível explicar cabalmente a significação de todos os detalhes de um trabalho mais próprio para estimular a imaginação do que para falar à inteligência, tentarei descrever, pois que isso me é pedido, e ainda que de uma maneira um tanto vaga, o desenvolvimento desta composição. Como em qualquer outro trabalho de carácter artístico, a minha primeira preocupação foi fazer qualquer coisa de interessante, procurando dar ao Ex-libris um aspecto não vulgar, pelo qual se distinguisse à primeira vista de quaisquer outros selos ou marcas de aplicação menos elevada. Depois, dentro da categoria de Ex-libris, havia neste caso que achar em primeiro lugar uma feição especial que definisse o seu carácter impessoal e em seguida um conjunto de motivos próprios de uma instituição universitária.

Além dos dizeres que me foram dados para incluir na composição, foi-me também sugerida a ideia de introduzir nela o galeão das armas da cidade, motivo que achei decorativo, além de muito apropriado. Representei pois no centro da composição o galeão da cidade de Lisboa com os seus dois corvos, mas fi-lo evitando qualquer intenção pictórico-naturalista, isto é: conservei-lhe o carácter de uma representação *heráldica*, evidenciando portanto a sua verdadeira significação. Foi também com o intuito de desmaterializar o motivo que o suspendi ao centro do espaço cósmico, que por sua vez se relaciona claramente com as Faculdades de uma Universidade. O galeão navegando tem, além da sua origem heráldica, certa sugestão etnográfica. Com respeito à sua posição e direcção em que navega parece-me escusado observar que, a não ser em cartas geográficas ou astronómicas ou em certas paisagens, não há em desenhos heráldicos ou decorativos orientação convencional como naquelas ou orientação evidente como nestas; não podemos ter aqui nem norte nem sul, nem oriente ou ocidente; temos apenas direita ou esquerda heráldica. E se o galeão navega para a direita heráldica (esquerda do observador) é simplesmente por assim o ter visto representado muitas vezes em armas antigas ou modernas e oficiais da cidade de Lisboa.

Todo o motivo do galeão com o mar está inundado de luz em relação ao fundo, valorizando assim o lema da Universidade. As duas colunas, além de se prestarem a enriquecer a composição geral, podem também sugerir a obra construtiva e a acção civilizadora das universidades. Adoptei propositadamente para o desenho dos capitéis não um modêlo helênico puro que eu receava pudesse ter uma significação humanista exclusiva, mas sim o feitiço mixto de capitéis visigóticos como símbolo mais largo da civilização ariana.

Contudo e apesar desta escolha, mais ou menos feliz, de motivos, creio que o valor do trabalho, se é que o tem, reside apenas no acêrto da disposição geral, gráficamente falando, numa palavra – no interêsse do aspecto decorativo.

Lisboa, Maio de 1914.

Raúl Lino, Arquitecto.

Pequena Crônica Arqueológica *

Pierre Laszlo [‡]

A estrutura do icosaedro

Os sólidos de Platão foram notícia com a distinção atribuída ao Dr. Aaron Klug, do Laboratório de Biologia Molecular do Conselho de Investigação Médica, em Cambridge, Inglaterra, do prêmio Nobel da Química em 1982. Klug, um colaborador de Rosalind Franklin que assumiu a liderança do grupo após a sua morte prematura, em 1958, foi homenageado, se posso resumir sucintamente os seus estudos, por inventar métodos cristalográficos especiais para processamento de dados de difração óptica de micrografias de electrão de modo a «observar» a ordenação bidimensional que consitui o revestimento proteico dos vírus; pelo conceito de quasi-equivalência e por enumerar todas as formas possíveis para partículas isométricas tais como vírus; por elucidar em pormenor a estrutura do vírus mosaico do tabaco, na qual se empilham, em hélice, discos constituídos por 2 camadas de 17 subunidades proteicas cada, com a cadeia de RNA enrolada entre as espiras daquela hélice. Estes são os resultados fundamentais.

O que aqui pretendo, de modo a ligar o seu trabalho à química estrutural contemporânea e também mostrar a introdução das suas ideias na bioquímica e na química, é sublinhar um único tópico, o da estrutura proteica nos tão falados vírus icosaédricos.

Em primeiro lugar, o que é um icosaedro? O leitor lembrar-se-á dos 5 sólidos de Platão: o tetraedro, o octaedro, o cubo, o dodecaedro e o icosaedro. Estes são os únicos poliedros regulares inscritíveis numa esfera, e construídos a partir de polígonos idênticos. O icosaedro (do grego *icosa* = vinte) tem $F=20$ faces na forma de triângulos equiláteros. $C=12$ vértices e, conseqüentemente (da fórmula de Euler (1752) $E=F+C-2$), $E=30$ arestas.

Existem estruturas inorgânicas formadas por, ou baseadas em, icosaedros. Pequenas aglomerações de átomos de ouro encontradas em microcristais, designadas *cristalóides* por Mackay [1], possuem formas icosaédricas de 13, 55, 147, 309 e 561 átomos que são estáveis em relação ao arranjo competitivo cúbico de faces centradas [2]. Muitas estruturas de ligas metálicas envolvem também icosaedros e seus derivados.

Tal como o dodecaedro, o icosaedro não aparece apenas no domínio inorgânico. A Biologia também se serve do icosaedro. Os vírus são um caso particularmente importante. A ideia original sobre a construção estrutural dos vírus deve-se a Crick e Watson, em 1956 [3]. Neste artigo da «Nature», eles sugeriram que vírus de configuração em haste são consti-

tuídos por arranjos helicoidais, e os vírus esféricos por arranjos cúbicos de subunidades de proteína. Uma vantagem biológica de usar subunidades idênticas é que, conseqüentemente, uma quantidade mínima de informação tem de estar codificada no ácido nucleico virulento [3].

Debrucemo-nos sobre os vírus esféricos. Há três tipos de simetria cúbica: tetraédrica (grupo pontual 2:3), octaédrica (4:3:2), e icosaédrica (5:3:2), correspondendo aos números máximos de 12, 24, e 60 subunidades idênticas.

Foi este o ponto de viragem para a teoria dos vírus, entendidos como partículas isométricas com formas poliédricas uma vez que já era conhecido, nos fins dos anos 50 e 60, que muitos vírus eram constituídos por várias centenas de subunidades de proteína. Parecia haver aqui uma contradição lógica ou um paradoxo.

A solução veio de um artigo original do nosso laureado, A. Klug, em colaboração com D.L.D. Caspar, em 1962 [4]: eles mostraram, não só, que a simetria icosaédrica é vantajosa em relação às simetrias cúbicas alternativas (60, em vez de simplesmente 12 ou 24 subunidades), mas também, resultado de longe mais importante, que não existe limite para o número de subunidades que pode ser arranjado numa rede icosaédrica, uma vez que o requisito da equivalência pontual é abandonado em favor do requisito menos restritivo da *quasi-equivalência*.

O que é a *quasi-equivalência*? Simplesmente o reconhecimento de que, na formação de uma camada poliédrica estável as subunidades de proteína tenderão a formar, umas com as outras, tantas ligações quantas as possíveis, e que «as subunidades não necessitam de estar em locais *exactamente* equivalentes para que a energia do sistema seja mínima» [5]. E o maior grau de quasi-equivalência está associado ao icosaedro [4]. Caspar e Klug [4] procederam, então, à enumeração de todas as redes icosaédricas possíveis, redescobrimo uma enumeração de Goldberg [6], antiga e desconhecida, que permanecia como uma curiosidade matemática desde 1937! Mostraram que camadas fechadas com subunidades quasi-equivalentes, simétricas, podem ser construídas com 60 T subunidades, onde T, o tão falado número de triangulação, é dado pela relação $T=Pf^2$, onde f é qualquer inteiro, e P pertence à sequência 1, 3, 7, 13, 19, 21, 31, 37... ($h^2 + hk + k^2$, para todos os pares de inteiros h e k sem nenhum factor comum).

* Traduzido por Filomena Freitas, com o acordo do Prof. Pierre Laszlo, de «Petite Chronique Archéologique», *Nouv. J. Chim.*, 7, 145 (1983).

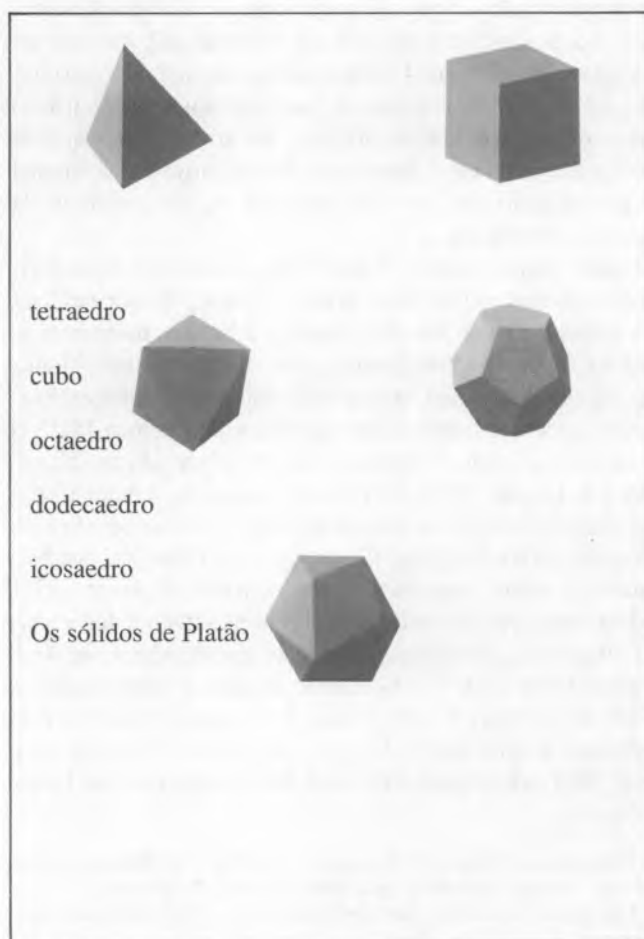
‡ Laboratoire de Chimie, École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, França.

Além disso, numa rede de superfície simples, constituída por 420 subunidades, por exemplo, a aglomeração de subunidades pode produzir uma variedade de aspectos «isoméricos»: agrupamentos em dímeros conduzem a 210 unidades morfológicas, agrupamentos em trímeros produzem 140 dessas unidades, etc. Para ilustrar isto com exemplos concretos, pode dizer-se que o agrupamento de dímeros na superfície do vírus do tomate (*tomato bushy stunt virus*) produz 90 unidades morfológicas ($T=3$), enquanto que agrupamentos hexâmeros – pentâmeros na superfície dos vírus *Polyoma e papilloma* ($T=7$) produzem 72 unidades morfológicas [5]. O trabalho de Klug e seus colaboradores foi tão importante que alterou a sistematização dos vírus. Daí em diante, os vírus icosaédricos surgiram como uma classe independente e importante (Tabela I).

TABELA I
Alguns dos vírus icosaédricos

<i>Brome mosaic virus</i>	<i>Polyoma virus</i>
<i>Cowpea chlorotic mottle virus</i>	<i>Single-stranded RNA phages</i>
<i>Cucumber papilloma virus</i>	<i>Southern bean mosaic virus</i>
<i>Papovaviruses</i>	<i>Tomato bushy stunt virus</i>
<i>Polio virus</i>	<i>Turnip yellow mosaic virus</i>

As formas de todos estes vírus icosaédricos são determinadas apenas pelas propriedades das subunidades de proteína, especialmente pelas (presumíveis) interações hidrofóbicas entre aqueles. Esta afirmação pode ser reescrita recorrendo a Francis Crick [3]: «uma Natureza eficiente esboçaria as



partes de um vírus (ou de outro modelo macromolecular regular) de tal modo que, dado um modelo apropriado das partes a uma criança, ela as pudesse juntar *de um único modo*. As cúpulas geodésicas de R. Buckminster Fuller podem relacionar-se com a impossibilidade de construir uma estrutura fechada sem hexágonos. Consequentemente, a sua superfície é construída a partir de triângulos quasi-equivalentes, no sentido acima definido [4], de modo que, por exemplo, uma esfera completa é composta de 720 unidades e os triângulos pertencem a 12 tipos (ligeiramente) diferentes. Na sua conceptualização do modelo virulento, Caspar e Klug basearam-se na técnica do engenheiro de génio, R. Buckminster Fuller, e os seus artigos, começando com a discussão de 1962 [4], reconhecem explicitamente a sua dívida para com as ideias e a ajuda de Fuller.

Na verdade, sempre que se associam elementos por interações de curto-alcance em oposição às de longo-alcance, sejam eles nucleões no núcleo atómico, átomos nas moléculas ou moléculas nos modelos supramoleculares, tais como os clatratos dos gases raros ou dos vírus, podem e formam-se poliedros. E entre estes, os sólidos de Platão continuam a ser os eternos favoritos; o icosaedro continua a ser a escolha predominante, pela razão acima apresentada, quando as subunidades de proteína se reúnem para formar um revestimento virulento.

Para terminar, não resisto em chamar a atenção para uma esquecida e algo patética figura, a da cristalógrafa, bioquímica e matemática Dorothy M. Wrinch (1895-1976). Ela propôs nos anos 30 a chamada «teoria cyclol» da estrutura das proteínas para explicar o carácter ordenado das moléculas de proteína o qual, nessa época, começava a ser detectado a partir dos primeiros dados de raios X de proteínas, obtidos por J.D. Bernal e Dorothy Crowfoot Hodgkin. A sua teoria foi inicialmente uma adversária viável à de Linus Pauling: a teoria de Wrinch baseava-se no arranjo de aminoácidos em peptídeos cíclicos, enquanto a de Pauling se baseava nas ligações de hidrogénio, conduzindo a hélices α e lâminas β . A teoria de Pauling mostrou-se, evidentemente, ser aceitável e a de Wrinch caiu rapidamente em descrédito. Porém, olhando apenas para modelos descritos nos seus artigos [8,9], verifica-se que eles se anteciparam de um modo notável às estruturas propostas por Crick e Watson [3], e por Caspar e Klug [4], para as partes proteicas dos vírus. Por exemplo, Wrinch propôs uma molécula na forma de um tetraedro truncado com 288 resíduos de aminoácido que se parece bastante com algumas das construções icosaédricas.

Não encontrei qualquer referência aos trabalhos de Wrinch nas publicações de Klug e Caspar: no entanto, eles tinham podido encontrar conteúdo precioso nos seus artigos, muito mais de acordo com os seus próprios interesses do que as cúpulas de radar e estádios desportivos construídos por Buckminster Fuller.

Qual a lição a retirar daqui: que a ciência é rancorosa, que estar errado é um pecado mortal, e que o esquecimento em vez da absolvição é o resultado frequente! Muitas vezes, porém, o historiador de ciência tem visto, quão proveitoso pode ser, num campo, um conceito que se tornou de valor duvidoso no seu domínio original. Aqui está um bom problema para filósofos de ciência: o que significa «estar correcto»?

Agradecimentos

Apresento os meus agradecimentos pela hospitalidade de Susan L. Boone, e pelo apoio dos empregados da Coleção de Sophia Smith, no Colégio Smith, onde consultei os artigos de Dorothy Wrinch em 4 de Maio de 1982.

Referências

- [1] A.L. Machay, Iz. Jugoslav. centra za kristalog., **10**, 15-36 (1975).
[2] M.R. Hoare, Adv. Chem. Phys., **40**, 49 (1979).

- [3] F.H.C. Crick, e J.D. Watson, Nature, **177**, 473-475 (1956).
[4] D.L.D. Caspar, e A. Klug, Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol., **27**, 1-24 (1962).
[5] L. Makowski, em Biological Recognition and Assembly, A.R. Liss, New York, 1980, pp. 233-258.
[6] M. Goldberg, Tohoku Math. J., **43**, 104-108 (1937).
[7] D.L.D. Caspar, Biophys. J., **10**, 103-138 (1980).
[8] D.M. Wrinch, Nature, **139**, 972-973 (1937).
[9] D.M. Wrinch, Proc. Roy. Soc. London, **A161**, 505-524 (1937).

Convite à Reflexão...

Suspensão Coloidal

*Penso no ser poeta, e andar disperso
na voz de quem a não tem;
no pouco que há de mim em cada verso,
no muito que há de tudo e de ninguém.*

*Anda o cego a tocar La Violetera,
e eu a vê-lo, e a cegar;
e a pobre da mulher esfregando e pondo a cera,
e eu a vê-la, e a esfregar.*

*Que riso perto, que aflição distante,
que ínfima débil, breve coisa nada,
iça, ao fundo, esta draga carburante,
rasga, revolve e asfalta a subterrânea estrada?*

*Postulados e leis e lemas e teoremas,
tudo o que afirma e jura e diz que sim,
teorias, doutrinas e sistemas,
tudo se escapa ao autor dos meus poemas.
A ele, e a mim.*

António Gedeão, «Poesias Completas»



instrumentos de laboratório e científicos lda

LISBOA ~ PORTO ~ PONTA DELGADA

AA - ICP - FT-IR - UV - VIS - GC - HPLC
TERMO ANÁLISE - BIOQUIMICA - UV - NIR

PERKIN ELMER

ESPECTROMETRIA DE MASSA

 **Finnigan
MAT**

Alltech

ACESSORIOS

CROMATOGRAFIA

REPRESENTANTE EXCLUSIVO



CRISON

PH - CONDUCTIVIMETROS - TITULADORES

BALANÇAS ELECTRONICAS

COBOS
precisión

AGITADORES - KJELDAHL - DIGEST. VAPODEST

 **Gerhardt**

ATAGO ~ ASTELL ~ ELMA ~ FISHER SCIENTIFIC ~ J.U.M.

HANSATECH ~ INGOLD ~ T. D. F. ~ ORBECO / HELLIGE

O Modelo de Resolução de Problemas como Investigação*

– sua aplicação à Química

Vicente Reyes Martín^a

Carlos J. Furió Mas^b



Carlos José Furió Mas

- *Licenciado em Ciências Químicas pela Universidade de Valência (1962); Doutorado em Ciências Químicas (especialidade de Engenharia Química) pela Universidade de Valência (1970).*
- *Professor Catedrático de Física e Química de Ensino Médio (1965).*
- *Professor do Departamento de Didáctica das Ciências Experimentais da Universidade de Valência (Escola de Formação do Professorado do E.G.B.).*
- *Professor do Serviço de Formação Permanente (ex-Instituto de Ciências de Educação) da Universidade de Valência (1981); Director da Secção de Formação Permanente do Professorado de E.E.M.M.*
- *Membro do Seminário Didáctico de Física e Química do S.F.P. da Universidade de Valência (desde 1973).*
- *Membro do Conselho de Redacção da Revista «Enseñanza de las Ciencias», desde a sua fundação em 1983.*
- *Membro do Comité de Organização das Jornadas Internacionais sobre Educação Científica (anuais) em Chamonix (França), desde 1984.*
- *Co-organizador e professor do Mestrado em Didáctica das Ciências Experimentais da Universidade de Valência e de Cursos de Formação de Formadores organizado pelo M.E.C. e pelas Universidades de Sevilha (1988) e Valência (1989), respectivamente.*
- *Co-autor de 15 livros de texto e vários artigos, material didáctico no domínio do ensino da Física e da Química.*
- *Assessor internacional em investigação em Didáctica das Ciências.*

Introdução

Um dos aspectos chave do ensino da Química, onde se verifica o maior índice de fracasso dos estudantes é o da resolução de problemas. Por isso não é de estranhar que, desde algum tempo, este aspecto constitua uma das principais linhas de investigação didáctica como mostra a bibliografia (Martínez-Torregrosa, 1984; Garret, 1986). Uma contribuição importante nestes estudos é o «Modelo de Resolução de Problemas de Física como Investigação» (Gil e Mtez Torregrosa, 1983 e 1988) com que se pretende ajudar a conseguir uma aprendizagem significativa dos conhecimentos científicos. Para tal é necessário conseguir uma mudança metodológica nos estudantes (e no professorado) que passa pelo abandono de práticas habituais na resolução de problemas baseadas numa metodologia de «sentido comum» (Hashweh, 1986) ou da superficialidade (Carrascosa e Gil, 1985), substituindo-as por outros métodos de resolução que tendam a familiarizar o estudante com aspectos essenciais de um trabalho com orientação científica, tais como definir de uma forma precisa um problema aberto, favorecer o pensamento divergente através do estabelecimento de hipóteses ou da elaboração de estratégias explícitas de resolução, aumentar a sua capacidade para analisar os resultados obtidos durante a resolução dos problemas, etc. Ao mesmo tempo, com a aplicação reiterada deste modelo de resolução, deve conseguir-se uma mudança de atitude positiva dos alunos perante a resolução de problemas: característica que obviamente não existe nas metodologias superficiais de resolução onde se fomentam atitudes passivas, quando não de repulsa. Neste trabalho pretende-se fazer realçar em que medida a aplicação continuada do «Modelo de Resolução de Problemas como Investigação» a estudantes de Física e Química do 3.º ano do B.U.P.** e de Química do C.O.U.***, poderá produzir os efeitos citados antes, de alterações metodológicas e de atitudes.

^a I.B. Txurdínaga Behekoa de Bilbao.

^b Servei de Formació Permanent. Universitat de València.

* Comunicação apresentada pelos autores ao III Congresso Internacional de Investigação em Didáctica das Matemáticas e das Ciências realizado em Santiago de Compostela (Setembro de 1989). Tradução de Maria Manuela Brotas de Carvalho, Professora Associada do Departamento de Química da Faculdade de Ciências de Lisboa.

** B.U.P. – Bacharelato Unificado Polivalente (9.º ano-11.º ano).

*** C.O.U. – Curso de Orientação à Universidade (12.º ano).

Formulação do problema e estabelecimento de hipóteses

Foi demonstrado rigorosamente (Mtez-Torregrosa, 1987; Gil e Mtez Terregrosa, 1988) que os problemas da Física se apresentam habitualmente como exercícios de aplicação, tanto nos livros de texto como pelos professores. A resolução é considerada como um processo linear, em que não há lugar para a dúvida, através do qual se vai directamente da utilização dos dados, sem nenhuma análise prévia, até à obtenção do resultado, que não se põe em dúvida, visto que o procedimento seguido é considerado absolutamente certo. Cabe esperar, deste modo, que o estudante ao confrontar-se com um problema trate de utilizar os dados e fórmulas como um jogo de quebra-cabeças, não analise a solução e, em definitivo, não se familiarize com aspectos chave da metodologia científica. Também se comprovou que é assim que acontece com exemplos de problemas de estequiometria elementares muito familiares aos alunos, mas que se apresentam com excesso de dados (Furió e Hernández, 1987). Assim, a questão didáctica que aqui se coloca trata de encontrar uma solução alternativa para aquelas formas de resolver os problemas de Química, mediante a aplicação do «Modelo de Resolução de Problemas como Investigação». Isto é, pretende-se dar resposta às seguintes perguntas:

Se se aplicar este método de resolução no contexto da Química:

- Favorecer-se-á um conhecimento de processos mais próximo do trabalho dos cientistas?
- Conseguir-se-á aumentar o êxito dos estudantes na resolução dos problemas de Química?
- Ficarão os estudantes mais interessados em resolver os problemas?

A hipótese trabalhada dá uma resposta afirmativa às questões anteriores dado que, com a prática reiterada do «Modelo de Resolução de Problemas de Química como Investigação», se espera uma mudança metodológica que aproxime os métodos dos alunos das características do trabalho científico, aumente a sua capacidade para resolver os problemas e ao mesmo tempo os motive.

Desenhos experimentais

Para falsear a hipótese anterior analisaram-se e compararam-se entre si as resoluções de problemas-exercícios habituais de Química, efectuados por alunos do 3.º do B.U.P. que nas aulas tinham praticado a resolução de problemas abertos como investigações (veja-se um exemplo de enunciado e de resolução destes problemas no Anexo), com as soluções dos alunos do 3.º e de Química do C.O.U. que nunca tinham experimentado este método. Mais em concreto, para estabelecer a comparação dos aspectos metodológicos e do êxito na resolução, planeou-se o correspondente protocolo (veja-se mais adiante na Tabela 1) que contém itens relativos a:

- O nível de utilização de seis aspectos fundamentais da metodologia científica, tais como se se faz uma formulação qualitativa do problema, se este se precisa, se se avançam hipóteses, etc.
- O grau de verbalização usado pelos examinandos, tais como a quantidade de frases por aluno, se se realiza uma resolução literal, etc.

- O tempo de aparecimento de fórmulas, reacções, etc.
- O nível de êxito conseguido (estratégia e resultados correctos), de abandono ou de resoluções incorrectas.

Por outra parte, a atitude dos alunos do grupo experimental em relação às metodologias e resolução de problemas propostos neste trabalho, e a atitude habitual foram avaliadas comparativamente através de outro protocolo (veja-se mais adiante a Tabela 3) que contém 11 itens que os estudantes tinham de classificar entre 0 e 10 (máximo interesse).

Resultados e análise dos mesmos

Nas Tabelas 1 e 2 apresentam-se os resultados encontrados quando se analisaram os aspectos metodológicos e o nível de êxito conseguido nas resoluções realizadas, respectivamente, por os alunos que serviram de controle (59 alunos do 3.º do B.U.P. e 62 de Química do C.O.U.) e pelos alunos em experiência (50 do 3.º do B.U.P.) a que se havia proposto um exercício estequiométrico de fácil reconhecimento dado que lhes era muito familiar.

Como pode apreciar-se há grandes diferenças a favor dos alunos do grupo experimental em aspectos essenciais à metodologia científica, tais como fazer uma formulação qualitativa da situação problemática (item 2), precisar o problema (item 3), formular hipóteses (item 4), considerar casos limites (item 5), elaborar previamente estratégias de resolução (item 7) ou analisar o resultado obtido (item 9). O mesmo se pode dizer em relação com o maior grau de verbalização dos examinandos que usaram o «Modelo de Resolução de Problemas como Investigação»; enquanto que nos alunos de controle, do C.O.U., foi contabilizada uma frase por estudante, nos alunos do grupo experimental há cerca de 11 frases por estudante. Para além disto, reconheceu-se que outra característica típica de metodologias superficiais de resolução de problemas é o hábito adquirido de abandono imediato (se o problema não é familiar e não se conhece a solução) ou de irreflexão na resposta, associada ao escasso tempo da sua resolução (quando o problema é familiar, como é o caso presente). A isto se dedicam os itens 1, 12, 14, e 15. Como era de esperar não há diferenças significativas nos abandonos, visto que estes problemas se realizam normalmente desde o 2.º ano do B.U.P. No entanto, o Gráfico 1, mostra as grandes diferenças existentes nos tempos de finalização do problema, que são muito maiores nos alunos do grupo experimental do que nos do grupo de controle. Por outro lado, é digno de destacar que, embora tratando-se de problemas tão familiares, o êxito dos estudantes do grupo experimental chega a ser praticamente o dobro (tanto na estratégia que é seguida, de 74%, como na correcção do resultado, de 62%) do dos alunos correntes (46.8% de estratégias correctas no C.O.U. e 32.2% de resultados correctos no 3.º ano do B.U.P.).

- Na Tabela 3 apresentam-se os resultados encontrados no protocolo relativo à atitude dos alunos do grupo experimental. Praticamente 100% destes estudantes indicam que a metodologia proposta de resolução de problemas de Química é diferente ou completamente diferente da utilizada no ano anterior (habitual) e as suas preferências são francamente mais positivas em relação à primeira. Nos 11 itens propostos existem preferências significativas a favor do modelo de

resolução proposto e destacam-se os itens relativos ao favorecimento de uma maior criatividade (item 8), ao hábito de uma maior divergência de pensamento (item 9) e inclusivamente à capacidade de imaginar novos problemas (item 11).

Conclusões

Neste trabalho aplicou-se o «Modelo de Resolução de Problemas como Investigação» no contexto da Química, durante todo um curso académico, aos alunos do 3.º ano de Física e de Química do B.U.P., e as mudanças de atitude e metodológicas obtidas compararam-se com as dos alunos de controle do mesmo curso e do C.O.U., utilizando como teste final um problema-exercício de estequiometria com excesso de dados. Os resultados vieram confirmar os resultados encontrados quando se aplicou o mesmo modelo aos alunos de Física (Gil, Mtez-Torregrosa e Senent, 1988). De qualquer forma será necessário avaliar mais extensamente este modelo, aplicando-o a novos tipos de problemas de Química.

Referências

- Carrascosa, J. y Gil, D., 1985, La «metodología de la superficialitat» i l'aprenentatge de les Ciències. *Enseñanza de las Ciencias*, 4 (1), 3-15.
- Furió C. y Hernández, J., 1987, La resolución superficial de problemas de Química: un ejemplo estequiométrico. *Enseñanza de las Ciencias*, extra, 199-200.
- Garrett, R.M., 1986, Problem-solving in Science Education, *Studies in Science Education*, 13, 70-95.
- Gil, D. y Mtez-Torregrosa, J., 1983, A model for problem-solving in accordance with scientific methodology. *European Journal of Science Education*, 5 (4), 447-455.
- Gil, D. y Mtez-Torregrosa, J., 1988, El fracaso de la resolución de problemas de Física: una investigación orientada con nuevos supuestos. *Enseñanza de las Ciencias*, 6 (3).
- Gil, D. y Carrascosa, J., 1985, Science learning as a conceptual and methodological change. *European Journal of Science Education*, 7 (3), 231-236.
- Hashweh, M.Z., 1986, Towards and explanation of conceptual change. *European Journal of Science Education*, 8 (3), 229-249.
- Martínez-Torregrosa, J., 1984, Bibliografía comentada sobre la resolución de problemas de Física y Química y su didáctica. *Enseñanza de las Ciencias*, 2 (2), 146-149.
- Martínez-Torregrosa, J., 1987, La resolución de problemas de Física como investigación: un instrumento de cambio metodológico, Tesis doctoral no publicada, Universitat de València.

ANEXO

Exemplo de um problema aberto resolvido segundo o «Modelo de Resolução de Problemas como Investigação»

PROBLEMA

Asfixiar-se-á uma pessoa que adormeceu num quarto fechado, onde se queima butano num aquecedor?

RESOLUÇÃO

Formulação do problema e estabelecimento de hipóteses

Formulação do problema

Nesta fase analisar-se-á a situação real proposta e estabelecer-se-ão as condições e aproximações que forem consideradas convenientes para delimitar a situação problemática aberta. Se for possível concretizar-se-á nesta fase aquilo que se deseja averiguar nas condições previamente definidas na análise do problema. Quer dizer, tornar-se-á o problema operacional.

Em princípio, as condições que podem ser consideradas são:

- admitir que o ar do quarto contém inicialmente uma percentagem molar ou volumétrica, z , normal dos seus componentes (que pode simplificar-se em 79% de azoto e 21% de oxigénio): o que quer dizer que é conhecida a quantidade de oxigénio, n_0 moles, presente inicialmente no quarto;
- supor que o quarto permanece hermeticamente fechado durante o processo e, assim, não há entrada de ar fresco nem saída de gases de combustão;
- Admitir que o fluxo da combustão do aquecedor é constante e uniforme, isto é, que sai sempre a mesma quantidade de substância por unidade de tempo, a qual é queimada enquanto houver oxigénio; assim, chamar-se-á f ao fluxo de gás que será medido em moles/segundo;
- supor que todos os gases implicados se comportam idealmente;

- considerar que o gás combustível é uma substância pura (o butano);
- considerar desprezável o consumo do oxigénio devido à respiração da pessoa adormecida em relação ao que é consumido pelo aquecedor;
- admitir que a asfixia da pessoa adormecida ocorre quando se tiver acabado o oxigénio do quarto;
- supor que o oxigénio do quarto se acaba antes do gás do aquecedor.

Nesta fase da formulação do problema e, em especial, durante a reunião com os alunos para recolha e debate das contribuições de cada grupo, podem surgir outras considerações que devem estar presentes no momento de passar à resolução do problema. Durante estes debates esclarece-se o que ocorre no quarto do ponto de vista químico. Fica claro que o processo de combustão não é uma reacção reversível e, por isso, não se alcança nenhum equilíbrio. Do mesmo modo, observa-se a existência de erros conceituais nos estudantes, tais como, por exemplo, o esquecimento frequente de que o oxigénio é um dos reagentes que participam no processo, ou que o ar é constituído maioritariamente por oxigénio, etc. Também pode surgir a confusão entre morte por asfixia e morte por ingestão de gases tóxicos, principalmente naqueles casos em que a combustão é incompleta e se produzem gases venenosos como o CO, distinto do CO₂, etc. Depois de todos estes aspectos diferentes tornar-se-á operacional o problema, ficando como pergunta a responder o tempo, t , que leva a esgotar-se completamente o oxigénio do quarto nas condições supostas.

Estabelecimento de hipóteses

Uma vez tornado operacional o problema, podem-se apresentar directamente as hipóteses em relação às variáveis que

podem influir no tempo, t , que leva a consumir o oxigénio e que, em definitivo, poderão ser traduzidas pela relação:

$$t = g(n_o, f)$$

sendo n_o a quantidade inicial de oxigénio no quarto (moles) que, por sua vez, dependerá da quantidade de ar presente (V_o , P_o , T_o e fracção molar, z , de oxigénio no ar) e f , o caudal molar do gás que se queima, em moles/minuto.

A primeira hipótese que normalmente é indicada pelos alunos é aquela em que t é directamente proporcional à quantidade inicial de oxigénio (referem frequentemente o volume ou o tamanho do quarto como a variável que mede a quantidade de oxigénio, sem mencionar a P e a T), pois, para um caudal constante de butano, quanto maior for n_o mais tempo poderá durar a combustão. Assim

$$t \propto n_o$$

Uma segunda hipótese apresentada é que para uma determinada quantidade inicial de oxigénio (ou, também, para um volume fixo do quarto), quanto maior for o caudal de butano que se queima (f) mais rapidamente desaparecerá o oxigénio, o que supõe que o tempo que leva a extinguir-se é menor. O que se pode representar por :

$$t \propto 1/f$$

Ambas as hipóteses podem sintetizar-se na expressão (1):

$$t = k n_o / f \quad (1)$$

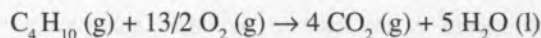
Para verificar a validade inicial desta expressão podem, nesta fase, propor-se algumas situações extremas, ou casos particulares do sistema (condições limites) que podem orientar-nos na correcção ou incorrecção desta primeira expressão. Por exemplo, se a quantidade inicial de oxigénio fosse nula ($n_o = 0$) a reacção não seria possível e o tempo seria nulo, ou se o caudal f da combustão do gás fosse muito elevado é evidente que também seria praticamente nulo o tempo que levaria a consumir-se o oxigénio do quarto.

Estratégias de resolução e resolução propriamente dita

O tempo t que leva a desaparecer o oxigénio do quarto, dependerá da quantidade inicial (n_o) e da velocidade com que desaparece (a que chamaremos f_o) ao combinar-se com o combustível no aquecedor. Assim, directamente:

$$t = n_o / f_o \quad (2)$$

Ora esta velocidade de desaparecimento do oxigénio dependerá, por sua vez, da velocidade de combustão (f) do combustível e da proporção estequiométrica de ambos os gases da combustão, pois, conforme seja uma ou outra, assim desaparecerá mais ou menos quantidade (moles) de oxigénio por cada mole de butano queimado. Ter-se-á portanto de procurar a relação geral entre f_o e f a partir da equação química de combustão. Como esta equação é:



pode facilmente observar-se a proporção entre as quantidades de gás e de oxigénio necessária para esta reacção química e que é:

$$n_g / 1 = n_o / 6,5 \quad (3)$$

donde se obtém a relação que se procurava entre f_o e f :

$$f_o = f \cdot 6,5 \text{ moles de oxigénio/minuto} \quad (4)$$

e, ao substituir a expressão (4) na (2) obtém-se:

$$t = n_o / f \cdot 6,5 \text{ minutos} \quad (5)$$

Se se quer exprimir o resultado em função das variáveis de estado do oxigénio no quarto (P_o , V_o , T_o e a fracção, z , de oxigénio no ar), a expressão obtida será:

$$t = P_o V_o z / f R T_o \cdot 6,5 \quad (6)$$

Expressão a que também se teria chegado se ao formular-se inicialmente o problema se tivesse centrado o interesse no volume do quarto em vez de fazê-lo na quantidade de oxigénio nele existente.

Análise do resultado

A equação resultante (5) pode comprovar-se que é homogénea e que satisfaz as hipóteses expressas na *formulação de hipóteses*, o que permite supor que a resolução é correcta. Pode também verificar-se que se cumprem as condições limites indicadas naquela fase de resolução (se $n_o = 0$, então $t = 0 \dots$).

No caso de existirem contradições entre algumas hipóteses e o resultado encontrado, haveria que rever as referidas hipóteses e/ou a resolução até eliminar estas contradições.

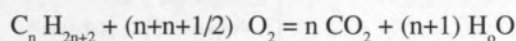
Outras considerações didácticas

O problema tal como foi proposto, com um único combustível gasoso, o butano, pode considerar-se como um nível de dificuldade próprio do terceiro do B.U.P. Mas a sua complexidade pode ser aumentada, conforme cada caso; assim, se na formulação inicial em vez de butano se considera que se queima um gás (não determinado) no aquecedor, na análise qualitativa inicial haverá que concretizar, pelo menos, que se trata de um hidrocarboneto saturado, ou de que mistura se trata. No primeiro caso haveria pois que considerar como hipótese que t depende da natureza do gás que se queima, influência que se infere da resolução anteriormente exposta, mas que não se tinha suposto inicialmente, uma vez que a composição se mantinha constante. Portanto, neste caso:

$$t = g(n_o, f, \text{ natureza do gás que se queima})$$

A natureza do gás combustível pode medir-se pelo número n de átomos de carbono/molécula, visto que, conforme a

composição molecular do gás, assim será necessária uma maior ou menor quantidade de moléculas de oxigénio. A estratégia estabelecida anteriormente mantém-se válida, mas a equação química de combustão será mais geral:



resultando finalmente a expressão (7):

$$t = n_0 / f (3n+1/2) \text{ minutos} \quad (7)$$

ou a expressão equivalente (8):

$$t = P_0 V_0 z / f R T_0 (3n+1/2) \text{ minutos} \quad (8)$$

onde se vê claramente a influência da natureza da substância que se queima sobre o tempo que leva a esgotar-se o oxigénio.

Assim, das equações (7) e (8) depreende-se que se a molécula do gás combustível tiver um maior número de átomos de C, isto é, quanto maior for a sua massa molecular relativa,

menos tempo levará a consumir-se o oxigénio (supondo que se mantêm constantes as dimensões do quarto e o caudal molar do gás que se queima).

Outro factor de complexidade «mais realista» que se pode introduzir é considerar que a asfixia não se produz quando se acaba o oxigénio, mas sim quando a quantidade deste se reduziu até à enésima (1/N) parte da inicial. Neste caso a quantidade de oxigénio que reage até ao momento de produzir a asfixia será $n_0 - n_0 / N$, e, conseqüentemente, a expressão do resultado virá dada por (9):

$$t = n_0 2 (1-1/N) / f (3n+1) \quad (9)$$

Pode assim concluir-se que a resolução de um problema aberto supõe para cada aluno definir «o seu» problema, com um grau de complexidade que ele próprio escolheu. Este «Modelo de Resolução de Problemas de Química como Investigação» não só familiariza os alunos com aspectos chave do trabalho científico, mas, para além disso, leva a imaginar novas complicações (em definitivo, novos problemas) como desafios ou reptos à inteligência do aluno.

TABELA 1
Resultados da análise da resolução de um problema habitual por alunos correntes

ASPECTO CONSIDERADO	3.º B.U.P. N=59		C.O.U. N=62	
	%	Sd	%	Sd
1. Os dados aparecem imediatamente	96,6	2,4	95,2	2,7
2. Faz-se uma formulação qualitativa	0	-	0	-
3. Precisa-se o problema	0	-	0	-
4. Formulam-se hipóteses	0	-	0	-
5. Consideram-se casos limites para contrastar com o resultado	0	-	0	-
6. Elabora-se uma estratégia antes de iniciar a resolução	0	-	0	-
7. A estratégia seguida é correcta	44	6,5	46,8	6,3
8. Realiza-se uma resolução literal	0	-	0	-
9. Analisa-se o resultado	0	-	0	-
10. O resultado é correcto	32,2		22,6	
11. Grau de verbalização	0,3	f/a	1	f/a
12. Alunos que abandonam	13,6	4,5	6,5	3,1
13. Alunos que abandonam ou resolvem de forma incorrecta	67,8	6,1	77,4	5,3
14. A equação química aparece:				
- nos primeiros cinco minutos	78	5,4	90,3	3,8
- entre cinco e dez minutos	0	-	1,6	1,6
15. Terminaram a resolução antes de (% acumulativa)				
- cinco primeiros minutos	15,3	5,1	12,9	4,3
- dez primeiros minutos	94,9	2,9	67,7	5,9
- quinze primeiros minutos	100	-	90,3	3,8
- vinte primeiros minutos	-	-	100	-

TABELA 2

Resultados da análise da resolução de um problema habitual por alunos do grupo experimental (N=50)

ASPECTO CONSIDERADO	3.º B.U.P.	
	%	Sd
1. Os dados aparecem imediatamente	18	5,4
2. Faz-se uma formulação qualitativa	62	6,9
3. Precisa-se o problema	72	6,3
4. Formulam-se hipóteses	82	5,4
5. Consideram-se casos limites para contrastar com o resultado	68	6,6
6. Elabora-se uma estratégia antes de iniciar a resolução	86	4,9
7. A estratégia seguida é correcta	74	6,2
8. Realiza-se uma resolução literal	64	6,8
9. Analisa-se o resultado	60	6,9
10. O resultado é correcto	62	6,9
11. Grau de verbalização	10,8	f/a
12. Alunos que abandonam	4	2,8
13. Alunos que abandonam ou resolvem de forma incorrecta	38	6,9
14. A equação química aparece:		
- nos primeiros cinco minutos	40	6,9
- entre cinco e dez minutos	16	5,2
- entre dez e quinze minutos	18	5,4
- entre quinze e vinte minutos	12	4,6
- entre vinte e quarenta minutos	14	4,9
15. Terminaram a resolução antes de (% acumulativa)		
- dez primeiros minutos	0	-
- vinte primeiros minutos	12	4,6
- trinta primeiros minutos	52	7,1
- quarenta primeiros minutos	90	4,2
- cinquenta primeiros minutos	98	2,0
- sessenta primeiros minutos	100	-

TABELA 3

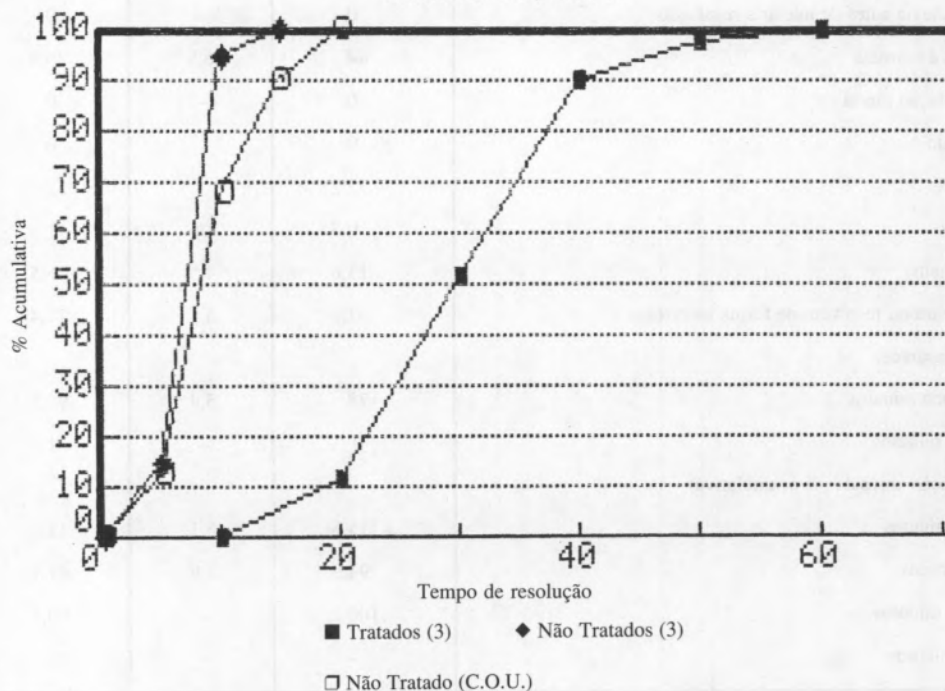
Valorização comparativa das atitudes geradas pelas diferentes metodologias de resolução de problemas utilizadas por alunos do grupo experimental (N=55)

ASPECTO CONSIDERADO	Metodologia Proposta	Metodologia Habitual
1. Provoca a consideração de experiências quotidianas da aula	7,8	4,9
2. Habitua a reflectir antes de tentar a resolução do problema	8,6	4,5
3. Facilita a compreensão dos conceitos	7,6	4,1
4. A linguagem usada nos enunciados favorece o interesse pelo problema	7,3	4,9
5. Exige uma reflexão sobre os conceitos	8,3	4,6
6. Produz autoconfiança no momento de resolver o problema	7,8	4,1
7. Elimina o abandono perante um problema desconhecido	7,0	4,2
8. Obriga a ser criativo	8,6	2,6
9. Habitua a imaginar diferentes formas de resolver um problema	8,1	2,9
10. Habitua a analisar cuidadosamente os resultados	8,3	3,6
11. Induz geralmente à formulação de novos problemas	7,9	3,0

A metodologia utilizada neste curso na resolução de problemas comparada com a do curso anterior (habitual) é:

	%	Sd
Igual	0	-
Distinta	27,3	6,0
Completamente diferente	72,7	6,0

FIGURA 1
Problema de estequiometria



Trabalho Experimental

– a construção de fichas experimentais

Mariana P. Pereira ^a

No ensino da química, como no de qualquer ciência, deve haver lugar para uma componente experimental [1]. Podem considerar-se diversas perspectivas no trabalho experimental como exercícios, experiências (efectuadas pelos alunos ou demonstradas pelo professor) e investigações, cada uma das quais com finalidades específicas [2]. No nossa conjuntura educacional actual é importante conhecer: (1) as razões que os professores advogam para a frequente não inclusão de trabalhos de tipo laboratorial, (2) as justificações que, por um lado, são invocadas pelos professores para a utilização de uma das perspectivas referidas anteriormente, o modo de as implementar (com material corrente ou com material em pequena escala de baixo custo) e as vantagens e dificuldades que apresentam para o ensino-aprendizagem das ciências [3] e, por outro lado as reacções que os alunos manifestam face a tarefas de índole experimental [4].

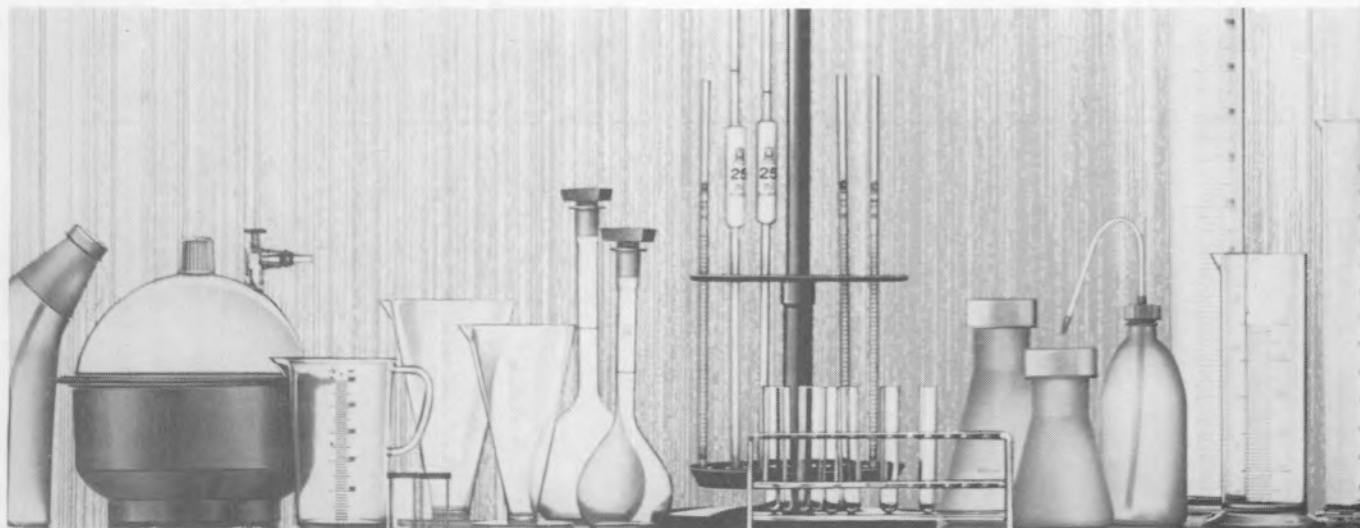
A apresentação de diferentes situações experimentais faz-se habitualmente com uma ficha. A que está ilustrada no Quadro I foi construída com base num esquema que teve boa aceitação aquando do trabalho realizado pelos participantes num atelier da VII Conferência Internacional de Educação em Química [5] e tem sido utilizada em programas de formação de professores [6]. Esta ficha contém a identificação da experiência e do ano/nível a que se destina, a explicitação dos objectivos para a sua inclusão, a indicação do material e reagentes necessários, a explicação do modo de proceder e dos cálculos a realizar e uma chamada de atenção

sobre condições de segurança que se impõem para a realização.

Exemplifica-se esta ficha para duas demonstrações: electrólise de uma solução de cromato de cobre (II) em meio ácido (Quadro II) e Reacção «Termite» (Quadro III). Ambas requerem uma prática exímia que, no último caso, tem que estar aliada a grandes cuidados de segurança. A exploração a efectuar com cada uma das demonstrações é descrita na própria ficha, salientando-se, no segundo caso, abordagens que se podem realizar a níveis diferentes de escolaridade.

Referências

- [1] Barbosa, M.V., Carmo, J.M., Cruz, M.N., Guimarães, H.M., Pereira, M.P. (1989). O ensino das ciências no 3.º ciclo da escolaridade básica. *CTS – Revista de Ciência, Tecnologia e Sociedade*, n.º 7/8, 74-87.
- [2] Woolnough, B. and Alssop, T. (1985) *Practical work in science*, Cap. 4. Cambridge: Cambridge University Press.
- [3] Pereira, A.S., Freire, A.M., Malhoa Gomes, M.M., Sousa Ramos, M.M. Barbosa, M.V. (1989). Um estudo sobre a utilização de trabalho experimental. In Pereira, M.P., ed. (1989). *Formação de professores de Química/Ciência – desafios para um mundo em mudança*, pp. 123-129. Lisboa: Sociedade Portuguesa de Química.
- [4] *Olimpíada de Química, zona Sul, 1989* – Questionário. (Publicação interna da SPQ, Lisboa).
- [5] Delplancke, A. (1983). Atelier sur Enseignement experimental au secondaire. *7th International Conference on Chemical Education*. Montpellier: USTL.
- [6] Pereira, M.P. (1987). *Metodologia da Química 1986-1987*. Unidade didáctica 2. Lisboa: Escola Superior de Educação de Lisboa.



^a Departamento de Educação, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Rua Ernesto de Vasconcelos, Cl 3 – 1700 Lisboa.

QUADRO I
Fichas relativas a demonstrações e experiências

Título: Proponente: Escola:		Ano(s) a que se destina	Duração	Demonstração pelo professor <input type="checkbox"/> Experiência pelos alunos na aula <input type="checkbox"/> Experiência pelo alunos no laboratório <input type="checkbox"/>
Objectivos:			Pré-requisitos	
Material:	Procedimento e Cálculos:		Esquema / Diagrama:	
Reagentes:				
Bibliografia:			Precauções / Segurança:	

QUADRO II
Fichas relativas a demonstrações e experiências

<p>Título: Electrólise de solução de cromato de cobre (II) em meio ácido</p> <p>Proponente / Escola: Mariana P. Pereira / FCULisboa</p>	<p><i>Ano(s) a que se destina</i></p> <p>9 Quimicotecnia</p>	<p><i>Duração</i></p> <p>45 minutos</p>	<p><i>Demonstração pelo professor</i> <input checked="" type="checkbox"/></p> <p><i>Experiência pelos alunos na aula</i> <input type="checkbox"/></p>
<p>Objectivos: Realizar e interpretar a migração de iões por acção da corrente eléctrica</p>		<p>Pré-requisitos: Iões; substâncias iónicas; equações iónicas; equilíbrio cromato/dicromato</p>	

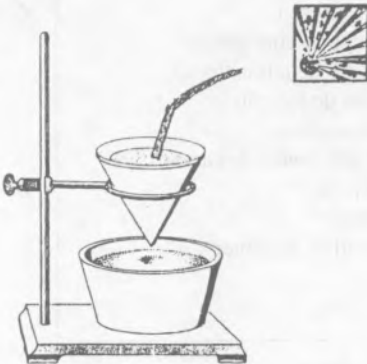

<p>Material:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Tubo em U - Suporte com pinça - fonte de alimentação - fios de ligação - crocodilos - 2 eléctrodos de carvão - pipeta - pêra - funil de Buchner 	<p>Procedimento:</p> <p>A – Preparação da solução de cromato de cobre (II) saturada em ureia.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1 – Juntar 100 cm³ de solução de sulfato de cobre e 100 cm³ de cromato de potássio. 2 – Filtrar num funil de Buchner e lavar o precipitado. 3 – Dissolver o pp. no volume mínimo de HCl 2,0 mol dm⁻³. 4 – Dissolver na solução obtida em 3 toda a ureia possível até obter uma solução saturada (com densidade mais elevada). <p>B – Realização da experiência</p> <ol style="list-style-type: none"> 1 – Montar o tubo em U no suporte. 2 – Encher 1/3 do tubo em U com HCl 2,0 mol dm⁻³. 3 – a) Com uma pipeta que vá até ao fundo do tubo em U deixar cair muito lentamente a solução de cromato de cobre (II) saturada em ureia. <li style="padding-left: 20px;">b) Retirar a pipeta com muito cuidado (para impedir que se misturem as soluções). 4 – a) Introduzir um eléctrodo de carvão em cada um dos ramos do tubo em U. <li style="padding-left: 20px;">b) Ligar os eléctrodos a uma fonte de alimentação de corrente contínua de cerca de 20 V. <li style="padding-left: 20px;">c) Aguardar 30 minutos. <li style="padding-left: 20px;">d) Observar a coloração no cátodo e no ânodo. <p>Observações: No cátodo observa-se uma coloração verde e no ânodo observa-se uma coloração laranja.</p> <p>Interpretação: Na solução de cromato de cobre existem os iões respectivos:</p> $\text{CuCrO}_4(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{Cu}^{2+}(\text{aq}) + \text{CrO}_4^{2-}(\text{aq})$ <p>Por acção da corrente eléctrica estes iões movimentam-se orientando-se para os eléctrodos: para o ânodo CrO_4^{2-}, amarelo, e para o cátodo Cu^{2+}, verde.</p> <p>Como existe HCl a sobrenadar a solução dá-se a reacção entre os iões H^+ e CrO_4^{2-} originando $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$, de cor laranja.</p> <p>No ânodo: $2 \text{CrO}_4^{2-}(\text{aq}) + 2 \text{H}^+(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}(\text{aq}) + 2 \text{H}_2\text{O} (1)$</p>	<p>Esquema / Diagrama:</p> <p style="text-align: center;">solução de cromato de cobre (II) saturada em ureia</p>
<p>Reagentes:</p> <ul style="list-style-type: none"> - CuCrO_4 <li style="padding-left: 20px;">ou CuSO_4 e K_2CrO_4 - Ureia - HCl 2,0 mol dm⁻³ 	<p>Precauções / Segurança:</p> <p>Pipetar a solução usando a pêra.</p>	

Bibliografia:

Johnstone, A., Morrison, T., Reid, N. (1981). *Chemistry about us*, pp. 89-90. London: Heinemann. Nuffield (1971). *Collecção de experimentos*, pp. 114-115, Barcelona: Reverté. Pereira, M., ed. (1989). *Olimpíada de Química – enunciado de provas 1982-1988*, pp. 5-6, Lisboa: SPQ.

QUADRO III

Fichas relativas a demonstrações e experiências

<p>Título: Reacção «Termite» – versão A</p> <p>Autor / Proponente: Mariana P.B.A. Pereira</p> <p>Escola: Departamento de Educação da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa</p>	<p>Ano(s) a que se destina</p> <p>9.º (Q) - 11.º - 12.º</p>	<p>Duração</p> <p>3 minutos</p>	<p>Demonstração pelo professor <input checked="" type="checkbox"/></p> <p>Experiência pelos alunos na aula <input type="checkbox"/></p> <p>Experiência pelo alunos no laboratório <input type="checkbox"/></p>											
<p>Objectivos:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1 – Ilustrar uma reacção fortemente exotérmica (9.º Q) 2 – Extrair um metal de óxido correspondente (11.º Q) 3 – Exemplificar a acção redutora do alumínio (11.º - 11.º Q) 4 – Calcular entalpias de reacção (12.º) 		<p>Pré-requisitos: – reacção exoenergética</p> <p>– Oxidação / redução (11.º, 11.º Q, 12.º);</p> <p>– Operação metalúrgica (11.º Q);</p> <p>– Entalpia de reacção (12.º)</p>												
<p>Material:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Almofariz sem mão – Espátula – Papel de filtro circular – Esguicho de água – Fita de magnésio (rastilho) – Lata com areia seca – Lamparina e fósforos – Vidro de protecção 90x120 cm² – Suporte 	<p>Procedimento e Cálculos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Colocar um vidro 90x120 cm² a separar o local da reacção dos alunos. • Dobrar duas folhas de papel de filtro circular em cone. Ragar o vértice de um deles, que vai ser utilizado como exterior. • Colocar o cone interior dentro do exterior e colocá-los no suporte por cima da lata com areia. • Utilizar o almofariz e a espátula para misturar os reagentes; introduzi-los nos cones. • Colocar uma longa fita de magnésio (rastilho) dentro dos reagentes. • Imediatamente antes de iniciar a reacção retirar o cone interior de dentro do cone exterior e humedecê-lo com água destilada, tendo o cuidado de não utilizar água em excesso. • Voltar a colocar o cone interior dentro do exterior; atear o rastilho com uma lamparina (e não directamente com os fósforos) e afastar-se do local da reacção. • A reacção dá-se de modo espectacular e é fortemente exoenergética; os produtos de reacção caem pela extremidade dos cones para a lata com areia (por vezes o papel de filtro do cone incendeia-se). <p>Como a reacção é acompanhada por grande elevação de temperatura, deve ser efectuada apenas pelo professor, observando-se as precauções indicadas.</p> <p>A entalpia da reacção entre o alumínio e o oxigénio é muito elevada:</p> $2 \text{Al (s)} + 3/2 \text{O}_2 \text{(g)} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 \text{(s)} \quad \Delta H^\ominus = -1675,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ <p>• O valor elevado da entalpia de formação do óxido de alumínio está na base da extracção de muitos metais de transição dos óxidos correspondentes, usando alumínio em pó. Os cálculos da entalpia da reacção «termite» para o caso de Fe₃O₄ dão:</p> $3 \text{Fe}_3\text{O}_4 \text{(s)} + 8\text{Al (s)} \rightarrow 9 \text{Fe (s)} + 4 \text{Al}_2\text{O}_3 \text{(s)}$ $4 \times \Delta H^\ominus_f(\text{Al}_2\text{O}_3) + 3 \times \Delta H^\ominus_f(\text{Fe}_3\text{O}_4) = [4 \times (-1675,7) - 3 \times (1117,1)] \text{ kJ mol}^{-1}$ <p>A entalpia de reacção por grama de reacção «termite» é $\frac{-3351,5 \text{ kJ mol}^{-1}}{918,4 \text{ g mol}^{-1}} = -3,64 \text{ kJ g}^{-1}$</p>	<p>Esquema / Diagrama:</p> 												
<p>Reagentes:</p> <table border="0"> <tr> <td></td> <td>(0,05 mol)</td> </tr> <tr> <td>– Alumínio em pó</td> <td>2,5 g</td> </tr> <tr> <td>– Um dos seguintes óxidos em pó</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Fe₂O₃</td> <td>8,0 g</td> </tr> <tr> <td>Cr₂O₃</td> <td>7,5 g</td> </tr> <tr> <td>CuO</td> <td>11,9 g</td> </tr> </table>		(0,05 mol)	– Alumínio em pó	2,5 g	– Um dos seguintes óxidos em pó		Fe ₂ O ₃	8,0 g	Cr ₂ O ₃	7,5 g	CuO	11,9 g	<p>Precauções / Segurança: </p> <p>Reacção muito perigosa a realizar pelo professor.</p> <p>Atear o rastilho com a lamparina e não com fósforo que pode cair para a mistura reagente e provocar o início da reacção sem que o professor tenha tempo de se afastar.</p> <p>Utilizar um vidro de protecção dos alunos.</p> <p>Afastar-se logo que o rastilho se incendiar.</p>	
	(0,05 mol)													
– Alumínio em pó	2,5 g													
– Um dos seguintes óxidos em pó														
Fe ₂ O ₃	8,0 g													
Cr ₂ O ₃	7,5 g													
CuO	11,9 g													
<p>Bibliografia: – Aleya, H.A. (1965). <i>Tested demonstrations in chemistry</i>, p. 17. Eaton, Pennsylvania: Journal of Chemical Education.</p> <p>– Bandtock, J. and Hanson, P. (1974). <i>Success in chemistry</i>, pp. 196-197. London: John Murray.</p> <p>– Bozzelli, J. (1979). The thermite lecture demonstration. <i>Journal of Chemical Education</i>, 56, 675-676.</p> <p>– DES (1978) <i>Safety in science laboratories</i>, p. 14. London: HMSO.</p> <p>– Drago, R. & Brown, T. (1969). <i>Experiments in general chemistry</i>, pp. 173-176. Boston: Allyn & Bacon.</p> <p>– Espelund, A. (1975). Aluminothermic reactions. <i>Journal of Chemical Education</i>, 52, 400-402.</p> <p>– Leeks, R. (1980). Thermit reactions in sand mould. <i>School Science Review</i>, 61, 709.</p> <p>– Roebuck, P. (1978). The thermit process. <i>Education in Chemistry</i>, 16, 178-179.</p> <p>– Scottish School Science Equipment Center (1979). <i>Hazardous chemicals</i>. London: Oliver & Boyd.</p> <p>– Scottish Schools Science Equipment Research Centre (1981/1985). <i>Hazcards</i>. Edinburgh: SSERC.</p> <p>– The thermit reaction (1981). <i>Education in Science</i>, 92, 18.</p> <p>– Warn, J. (1980). <i>Concise chemical thermodynamics in SI units</i>, pp. 11-24. London: Van Nostrand Reinhold.</p>														

Se

*gosta de ler o Boletim SPQ
gosta de participar no Boletim SPQ
gosta de ter as suas contas em dia
gosta de dormir tranquilo*

Então

PAGUE A QUOTA



Junto envio o cheque nº _____ Banco _____

referente à(s) minha(s) quota(s) da SPQ do(s) ano(s) de 19__ a 1990*.

_____, ____ de _____ de 1990

Assinatura _____

* Em caso de dúvida telefone SPQ (01) 793 46 37

SPQ – QUOTAS

Sócio Efectivo	2500\$00
Estudante	900\$00

BOLETIM

Assinatura (4 números)	1500\$00 (no país) US\$ (no estrangeiro)
Número avulso	330\$00 (+150\$00 de porte de correio)

O Clube de Química

Escola Secundária Alfredo da Silva – Barreiro

Deixamos aqui uma breve nota sobre o funcionamento do nosso Clube, esperando que mais este exemplo possa incentivar a criação de outros grupos semelhantes, de modo que mais jovens possam ter com a Química e com a Escola de um modo geral um contacto mais informal e bem mais aberto, aliciante e participativo do que o que lhes é proporcionado pelas actividades curriculares.

O clube foi formado em 1988, numa reunião convocada para o efeito por um grupo de professores e teve a adesão imediata de muitos alunos da área de quimicotecnia. O modo de funcionamento está resumido no ponto seis do seu regulamento, que transcrevemos:

- 6.1 – Cada sócio ou grupo de sócios pode apresentar, em reunião geral, planos de trabalho.
- 6.2 – Uma vez aprovado um plano de trabalho será constituído um grupo, para sua execução, que poderá convidar para participação elementos não pertencentes ao Clube.
- 6.3 – As sessões dos grupos de trabalho decorrem com periodicidade quinzenal.
- 6.4 – O grupo referido em 6.2 dará conta do trabalho realizado em reunião geral de sócios.

Exemplificamos em seguida algumas das actividades desenvolvidas por dois dos grupos que funcionaram ao longo deste ano lectivo:

GRUPO INVESTIGAÇÃO – do seu trabalho destacamos:

- a) Pesquisa bibliográfica sobre reacções oscilantes e execução de algumas.
- b) Pesquisa bibliográfica sobre anéis de Liesegang e crescimento de cristais, concretização de algumas dessas técnicas e registo da sua evolução.
- c) Produção de «jardins químicos» por crescimento rápido de cristais.

A lenta evolução dos processos referidos em b) e a espectacularidade dos efeitos obtidos nalguns casos fascinou todos os que observaram os resultados.

GRUPO DEFESA DO CONSUMIDOR – depois de uma pesquisa inicial de testes tendentes a verificar a qualidade de alguns artigos, foram executados nomeadamente os seguintes: Determinação de sulfitos em amostras de salsichas e de fiambre. Determinação da existência de corantes em amostras de chás, sumos e «açafraão». Verificação da genuidade de amostras de Mel, etc. De salientar ainda a participação dos alunos mais novos (9.º ano) que colaboraram no início da construção de uma estação meteorológica, projectaram e construíram jogos relacionados com a Química e iniciaram a construção de uma T.P. gigante em que a descrição de cada elemento é feita com base em informações por eles obtidas através de pesquisa bibliográfica.

Angelina Regalo
(Professora Efectiva do 4.º B)

Partícula na Caixa

– um programa didáctico do modelo da partícula em poço de potencial para microcomputadores da família Apple II

Alexandre L. Magalhães^a

J. A. N. F. Gomes^a

Introdução

A resolução analítica exacta da equação de Schrödinger só é possível para sistemas materiais tão simples como o átomo de hidrogénio ou iões hidrogenóides. A obtenção de energias e funções de estado de sistemas atómicos e moleculares mais complexos terá de ser feita por intermédio de métodos numéricos de aproximação, como o perturbacional e o variacional, que conduzem a soluções não exactas.

Existem, no entanto, certos modelos que permitem a resolução analítica da equação de Schrödinger e que se revelam bastante úteis na compreensão de certos fenómenos de natureza química. Um desses modelos é o da partícula numa caixa ou poço de potencial.

O programa PARTÍCULA NA CAIXA constitui um apoio didáctico à apresentação teórica do modelo da partícula em poço de potencial, permitindo o controlo de parâmetros como o número quântico, comprimento da caixa e valor do potencial de uma das paredes do poço, assim como a rápida visualização dos seus efeitos nas soluções analíticas fornecidas por este modelo. Este programa proporciona, deste modo, uma assimilação mais completa de certos conceitos quânticos importantes inerentes ao modelo, nomeadamente, a quantificação da energia, densidade de probabilidade de presença da partícula, pontos nodais e efeito túnel.

Modelo da Partícula na Caixa

No presente trabalho procuram-se as soluções de estacionaridade e, por isso, trabalhar-se-á com a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \Leftrightarrow (\hat{E}c + \hat{E}p)\Psi = E\Psi \quad (1)$$

Considere-se então o caso unidimensional (por exemplo segundo a direcção do eixo xx') de uma partícula de massa m sujeita a um potencial da seguinte forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & ; x < 0 \vee x > L \\ 0 & ; 0 < x < L \end{cases} \quad (2)$$

Como o potencial é descontínuo, é conveniente escrever uma equação de Schrödinger para cada região de diferente potencial.

Para regiões de $V(x) = \infty$ obtém-se:

$$(-\hbar^2/2m)d^2\Psi_1(x)/dx^2 + \infty\Psi_1(x) = E\Psi_1(x) ; x < 0 \vee x > L \quad (3)$$

Para regiões de $V(x) = 0$:

$$(-\hbar^2/2m)d^2\Psi_2(x)/dx^2 = E\Psi_2(x) ; 0 < x < L \quad (4)$$

As soluções destas duas equações são respectivamente:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= 0 \\ \Psi_2(x) &= C \cos(kx) + D \sin(kx) \end{aligned} \quad (5)$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e C, D são constantes de integração.

Para garantir a continuidade da função a todo o domínio impõe-se que:

$$\Psi_2(0) = \Psi_2(L) = 0 \quad (6)$$

Daqui se conclui que a constante C e a quantidade $\sin(kL)$, presentes na expressão (5) terão de ser ambas nulas:

$$\begin{aligned} C &= 0 \\ e \\ \sin(kL) &= 0 \Rightarrow kL = n\pi ; n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (7)$$

A função na região $0 < x < L$ tomará então a seguinte forma:

$$\Psi_2(x) = D \sin((\sqrt{2mE}/\hbar)x) = D \sin(n\pi x/L) \quad (8)$$

A constante D será calculada pela condição de normalização, de acordo com a interpretação de Born para Ψ :

$$\int_D \Psi^* \Psi d\tau = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 1 \quad (9)$$

Obtém-se finalmente para este sistema as funções de estado:

^a Grupo de Química Teórica e Biofísica
Departamento de Química
Faculdade de Ciências, Universidade do Porto
Praça Gomes Teixeira
4000 Porto

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} 0 & ; x < 0 \vee x > L \\ \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L) & ; 0 < x < L \end{cases} \quad (10)$$

com as respectivas energias, deduzidas de (7):

$$E_n = n^2 h^2 / 8m L^2 \quad (11)$$

O número n , que surge pela imposição de uma condição fronteira, pode tomar valores inteiros positivos e é designado por número quântico.

Análise das soluções obtidas

Sob o ponto de vista didáctico, os aspectos mais importantes a salientar das soluções apresentadas em (10) e (11) são os seguintes:

– Em resultado das condições fronteira impostas, as energias só podem tomar valores discretos. Diz-se então que a energia está quantificada.

– A dependência da energia em n^2 , faz com que o espaçamento entre níveis de energia aumente com o n^o quântico:

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1)h^2 / 8m L^2 \quad (12)$$

– A dependência em L^{-2} , mostra que os níveis de energia e o seu espaçamento tomam valores superiores, quando se força a partícula a uma região mais restricta.

– A energia mínima que a partícula pode possuir não é nula (energia do ponto zero), como é de esperar, de modo a que o Princípio da Incerteza de Heisenberg seja obedecido.

– O número de nodos (pontos onde a função se anula) aumenta com n .

– Uma característica das funções que importa ainda salientar é o facto de serem ortogonais entre si, obedecendo portanto à relação:

$$\int_D \Psi_n^* \Psi_m d\tau = \delta_{nm} \quad (13)$$

Caixa de potencial unidimensional com uma das paredes finita

Considere-se a caixa apresentada anteriormente, baixando agora o potencial de uma das paredes para um valor finito V_0 . A partícula fica assim sujeita à seguinte função de potencial:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & ; x < 0 & \text{(REGIÃO I)} \\ 0 & ; 0 < x < L & \text{(REGIÃO II)} \\ V_0 & ; x > L & \text{(REGIÃO III)} \end{cases} \quad (14)$$

Para a REGIÃO I será nula.

Para a REGIÃO II as soluções são dadas pela resolução da equação de Schrödinger (4). Neste caso, porém, só se pode impor uma condição fronteira, obrigando a função a anular-se somente no ponto $x = 0$, pois em $x = L$ o potencial não é infinito. A solução para esta região será, então, dada por:

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \sin(2\pi x/\lambda_{II}) \quad (15)$$

onde $\lambda_{II} = h/\sqrt{2mE}$ e A_{II} é uma constante que se determinará no fim, pela condição de normalização da função total.

Para a REGIÃO III a equação de Schrödinger tomará a seguinte forma:

$$(-\hbar^2/2m)d^2\Psi(x)/dx^2 + V_0\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (16)$$

e terá de se considerar dois casos distintos: $E < V_0$ e $E > V_0$. No primeiro caso, a partícula encontra-se num estado ligado, não possuindo energia suficiente para passar a barreira de potencial. A solução da equação (16) é semelhante à apresentada em (5), preferindo-se aqui a seguinte forma alternativa:

$$\Psi_{III}(x) = A_{III} \exp(i2\pi x/\lambda_{III}) + B_{III} \exp(-i2\pi x/\lambda_{III}) \quad (17)$$

com $\lambda_{III} = h/\sqrt{2m(E-V_0)}$. A forma (17) é mais conveniente, dado que λ_{III} é uma quantidade imaginária, e assim os argumentos das exponenciais serão reais.

Para que esta função seja aceitável para descrever um estado ligado, ela deve anular-se quando x tende para infinito. Isto implica que B_{III} seja nulo:

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi_{III}(x) = 0 \Rightarrow \Psi_{III}(x) = A_{III} \exp(i2\pi x/\lambda_{III}) \quad (18)$$

Uma função de estado aceitável deve ainda ser unívoca, contínua e de primeira derivada contínua (excepto nos pontos onde o potencial é infinito). Assim, devem impor-se condições ao unir os dois fragmentos (15) e (18) no ponto $x = L$:

Para garantir a continuidade da função:

$$A_{II} \sin(2\pi L/\lambda_{II}) = A_{III} \exp(+i2\pi L/\lambda_{III}) \quad (19)$$

Para garantir a continuidade na 1ª derivada:

$$(2\pi/\lambda_{II})A_{II} \cos(2\pi L/\lambda_{II}) = (i2\pi/\lambda_{III})A_{III} \exp(+i2\pi L/\lambda_{III}) \quad (20)$$

Estas duas equações podem ser rearranjadas numa só, conduzindo à expressão:

$$\tan(2\pi L/\lambda_{II}) = -i\lambda_{II}/\lambda_{III} \quad (21)$$

Substituindo λ_{II} e λ_{III} pelas correspondentes expressões, obtém-se a equação:

$$\tan(2\pi L\sqrt{2mE}/h) = -E/\sqrt{V_0-E} \quad (22)$$

A única incógnita presente nesta igualdade é a energia E . Para um dado conjunto de valores de L , m e V_0 , só certas energias $E < V_0$ satisfazem (22) podendo ser determinadas através de um processo gráfico. (No programa PARTÍCULA NA CAIXA as resoluções desta equação foram efectuadas com o electrão ($m = 9.11 \times 10^{-31}$ Kg) e um comprimento da caixa $L = 25 \text{ \AA}$).

Encontrados os valores de E permitidos para a partícula, podem calcular-se λ_{II} e λ_{III} . Para o cálculo das constantes A_{II} e A_{III} , utiliza-se a condição de normalização da função total e a razão A_{II}/A_{III} obtida com a equação (19).

No caso da energia E ser superior a V_0 , o comprimento de onda λ_{III} é agora uma quantidade real. Prefere-se então para a solução geral da equação de Schrödinger referente à REGIÃO III, a seguinte forma:

$$\Psi_{\text{III}}(x) = C_{\text{III}} \sin(2\pi x/\lambda_{\text{III}}) + D_{\text{III}} \cos(2\pi x/\lambda_{\text{III}}) \quad (23)$$

A função total é uma senoide que oscila indefinidamente a partir do ponto $x = 0$, não se encontrando a partícula num estado ligado. Qualquer que seja $E > V_0$, é sempre possível ajustar a função $\Psi_{\text{III}}(x)$ à função $\Psi_{\text{I}}(x)$ no ponto $x = L$ (escolhendo convenientemente C_{III} e D_{III}). Isto tem como consequência a não quantificação dos valores de E , obtendo-se assim um espectro contínuo de energia.

Programa PARTÍCULA NA CAIXA

Com base neste modelo, foi elaborado um programa de muito fácil utilização, designado por PARTÍCULA NA CAIXA. Este trata o problema unidimensional da partícula de massa m , sujeita a dois tipos diferentes de função de potencial: poço de potencial infinito e poço de potencial com uma das paredes finita.

Com a execução deste programa, podem controlar-se parâmetros como o número quântico, comprimento da caixa, e valor do potencial de uma das paredes do poço, visualizando-se rapidamente os efeitos, nas soluções analíticas fornecidas por este modelo. O programa PARTÍCULA NA CAIXA permite, deste modo, a familiarização com certos conceitos quânticos importantes subjacentes ao modelo, podendo constituir um útil apoio didáctico à respectiva apresentação teórica.

Características do programa e recursos necessários à sua utilização

O programa foi elaborado em linguagem APPLESOFT/BASIC, e é apresentado em disco flexível de 5.25 polegadas. Para a sua utilização será necessário um microcomputador APPLE IIc, ou APPLE IIe com leitor de discos (DRIVE) apropriado.

Existem duas versões deste programa:

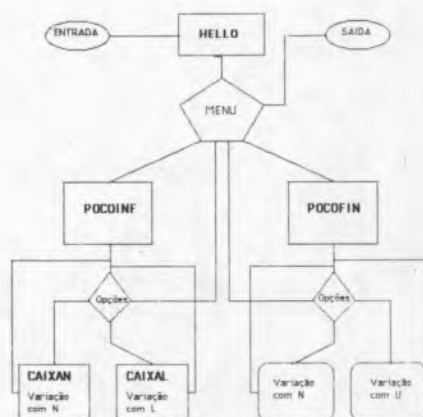
VERSÃO 1 – Apple IIe e Apple IIc – DOS 3.3 – APPLESOFT/BASIC não compilado.

VERSÃO 2 – Apple IIe e Apple IIc – ProDOS – APPLESOFT/BASIC compilado (compilação feita com o programa BEAGLE COMPILER).

O programa apesar de extenso, não carece de memória adicional, pelo que 64K de memória RAM, característico do Apple IIe, é suficiente para a sua execução.

Estrutura do programa

Este programa geral é constituído por vários subprogramas, que se interligam como é mostrado no seguinte esquema:



Os subprogramas que constituem o programa PARTÍCULA NA CAIXA têm as seguintes funções:

– Programa HELLO: Corre automaticamente quando o sistema é accionado, apresentando uma lista de opções que permite escolher o tipo de caixa a estudar, nomeadamente, a caixa de potencial infinito e a caixa com uma das paredes finita.

– Programa POCOINF: Permite estudar a caixa unidimensional de paredes infinitas. Apresenta inicialmente duas páginas de texto introdutório e uma lista de opções que permite seleccionar os parâmetros, cuja influência nas funções e energias se pretende observar.

– Programa CAIXA N: Mostra a influência do n^{o} quântico nas funções e energias da partícula, para um dado comprimento da caixa. Apresenta lado a lado o gráfico de duas funções de estado e respectivas funções densidade de probabilidade, com os n^{os} quânticos escolhidos pelo utilizador (N máximo = 9). Apresenta ainda para cada caso, o valor da energia em unidades de $h^2/8mL^2$.

– Programa CAIXA L: Mostra a influência do comprimento da caixa nas funções e energias da partícula. Exibe o gráfico da função com o n^{o} quântico escolhido, assim como a respectiva energia, permitindo ao utilizador variar o comprimento da caixa de um modo contínuo, desde -50% até +100%. Apresenta em seguida a nova energia e a respectiva função de estado sobreposta à inicial, sendo possível comparar as energias para os dois sistemas, através de dois gráficos apresentados lado a lado.

– Programa POCOFIN: Trata o problema da caixa com uma das paredes de potencial constante U (Estados ligados, $U > E$). Apresenta inicialmente duas páginas de texto introdutório e uma lista de opções onde se pode seleccionar como parâmetro a variar, o n^{o} quântico N ou o potencial da parede U . O parâmetro U permite uma variação discreta com os valores 1.0, 1.5 e 2.0 eV, e o n^{o} quântico N tem o valor máximo de 4. As funções são rapidamente apresentadas, assim como as suas características (valores da energia E , de N e de U), sendo possível comparar os níveis energéticos de dois sistemas, através de dois gráficos apresentados lado a lado.

Bibliografia

- J. P. Lowe, *Quantum Chemistry*, Academic Press, London, 1978.
- R. Dony, *Graphisme Scientifique sur Micro-Ordinateur*, Masson, Paris, 1986.
- S. J. Formosinho, A. J. C. Varandas, *Estrutura e Reactividade Molecular*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1986.
- P. W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1983.

Convite à Reflexão...

Solução Homogénea

*Correm as ondas apressadas
montanhas de moléculas
cada uma estupidamente metida na sua vida
a triliões de distância
formando em unísono a branca espuma.*

*Eras sobre eras
antes de quaisquer olhos as poderem ver
ano após ano
batendo atroadoramente na praia, como agora.
Para quem, para quê?
Num planeta morto
sem nenhuma vida para alimentar.*

*Incessantemente
torturadas pela energia
prodigiosamente esbanjadas pelo sol
atiradas para o espaço.
Uma migalha põe o mar a bramir.*

*Lá bem no fundo do mar
todas as partículas repetem
os padrões umas das outras
até novas e mais complexas se formarem.
Originam outras iguais a si
e um novo bailado começa.*

*Crescendo em tamanho e complexidade
coisas vivas
massas de átomos
ADN, proteínas
bailando num esquema cada vez mais intrincado.*

*Saídos do berço
para terra seca
eis aqui
erguendo-se:
átomos com consciência;
matéria com curiosidade.*

*Ali junto ao mar,
maravilhando-se com a maravilha: eu
um universo de átomos
um átomo no universo.*

R.P. Feynman, «Nem sempre a brincar Sr. Feynman!»

Deposição Electroless

J. P. Correia ^a
 A. P. Ricardo ^a
 L. M. Abrantes ^b

Introdução

A nível industrial, a *electroless* é extensivamente utilizada na preparação de materiais adequados a exigentes condições de aplicabilidade [1-3].

Não obstante, a interpretação plena do processo não está instituída e os mecanismos reaccionais envolvidos são matéria corrente de controvérsia científica.

Consequentemente, e anteendo potencialidades existentes na obtenção de novos materiais [4-6], o estudo e investigação fundamental relativos a esta área de desenvolvimento tecnológico concitam o interesse e mobilização de vastos recursos, particularmente nos países desenvolvidos [7,8].

Pese a importância da matéria, a natural especificidade implica na comunidade científica, não directamente envolvida, uma deficiente percepção do que é a *electroless*.

Assim, sem contemplar detalhes que importam ao âmbito restrito dos especialistas, o presente texto procura transmitir uma informação genérica, mas fundamentada, sobre o tema.

Caracterização sumária

A *Electroless*¹ é um processo autocatalítico de deposição metálica sobre um substrato, por redução dos correspondentes iões em solução, sem carecer de fornecimento externo de electrões, caracterizado por:

- i) Ausência de reacção envolvendo o substrato.
- ii) Selectividade, i.e., não ocorrência indiscriminadamente sobre qualquer material.

Difere, assim, de outros processos conducentes à formação de metal, igualmente isentos de consumo de energia eléctrica, nomeadamente o deslocamento galvânico ou reacção química espontânea.

Breve nota histórica

A *electroless* remonta a 1946, quando Abner Brenner e Grace Riddell, investigadores do National Bureau of Standards, USA, estudavam a electrodeposição de Níquel. A fim de obviar a oxidação anódica de determinados componentes da solução, adicionaram-lhe alguns agentes redutores, nomeadamente Hipofosfito de Sódio. Surpreendentemente, o Níquel depositado correspondia a uma eficiência de corrente de 130%, excedendo o máximo teoricamente previsível (Lei de Faraday).

Os mesmos autores vieram a verificar [9] que o excesso de

metal depositado devia-se a uma redução química, simultânea ao processo electrolítico.

Inicialmente denominada por *electrodeless*, um ano depois [10] surgiu a designação definitiva, *electroless*, até hoje instituída. Segundo o próprio Brenner [11], o nome realça a semelhança deste processo de deposição química com a electrodeposição, onde a reacção prossegue de forma contínua e constrói uma película de espessura macroscopicamente mensurável. Embora a descoberta lhes seja atribuída, os autores citados [9] referem trabalhos datados de 1845, onde foi observada a mesma redução do Níquel.

O sistema envolvido

A deposição *electroless* implica:

- i) Uma solução de iões metálicos.
- ii) Eventualmente um agente complexante desses iões, para evitar a sua precipitação na forma de sais insolúveis.
- iii) Um agente redutor, fonte dos electrões necessários ao processo de redução metálica.
- iv) Um substrato autocatalítico, ou catalisado apto a interagir com o redutor, promovendo a sua oxidação.
- v) Que o metal a depositar seja também autocatalítico, possibilitando a continuidade reaccional.
- vi) Aditivos que conferem ao depósito características físicas desejáveis.

Como não há recurso a fontes de energia eléctrica, a ausência de contactos possibilita usar-se qualquer tipo de substrato, mesmo não condutor (por exemplo, plástico, cortiça, aglomerado de madeira), desde que impregnado com um material catalítico.

A catálise pode envolver duas etapas:

– Sensibilização, através de uma solução ácida de Estanho (II) ou Titânio (III),

– Nucleação numa solução ácida de Paládio (II), em que o agente sensibilizador fica adsorvido à superfície do material, sendo oxidado pela solução de Paládio com simultânea formação de centros discretos de nucleação de Paládio metálico, onde a *electroless* irá iniciar-se. Após os primeiros instantes da reacção forma-se um filme homogéneo do metal a depositar, devido a coalescência dos núcleos [12-14] que permitirá a evolução do processo.

A catálise pode também ser realizada por simples imersão do substrato em soluções, por vezes coloidais, à base de Paládio

^a Departamento de Energias Renováveis, LNETI, Azinhaga dos Lameiros à Entrada do Paço do Lumiar, 1699 Lisboa Codex

^b CECUL, Departamento de Química, FCL, Rua da Escola Politécnica, 1294 Lisboa Codex

¹ Também designada Deposição Química ou Deposição Autocatalítica

[15,16]. As partículas de Paládio adsorvem-se, constituindo os pontos activos para o desencadear do processo.

No caso de condutores electrónicos naturalmente não catalíticos, o início da *electroless* pode ser induzido, através do contacto galvânico com um metal que lhe confira o potencial de electrodo compatível com o desencadear da reacção (Figura 1).

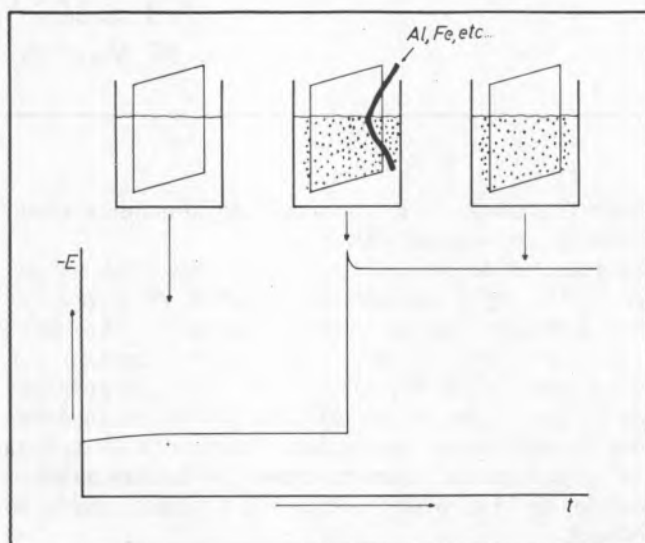


FIGURA 1

Efeito da indução sobre o potencial do espécime a recobrir (condutor electrónico não catalítico)

Como indutores são utilizados metais electronegativos (Al, Zn, Fe). A primitiva ideia [17,18] que a indução era devida ao par galvânico formado com o substrato, – os electrões gerados reduzindo o ião metálico a depositar – está ultrapassada. Com efeito, o processo age sobre o agente redutor conferindo ao substrato a capacidade de o adsorver e quebrar as suas ligações [19,20].

A Tabela 1 sumariza diversos metais depositados por *electroless* e os agentes redutores normalmente empregues.

TABELA 1

Agentes redutores usados em deposição *electroless* e metais por eles depositados.

AGENTE REDUTOR	METAL
Dimetilaminoborano	Ni, Co, Au, Ag [21]
Hipofosfito de sódio	Ni, Co [21], Pd, Cu [22], Ag [23], As [24]
Formaldeído	Cu [21,25]
Borohidreto de sódio ou potássio	Au [21], Ag [26]
Hidrazina	Pt, Pd [27], Ni [21], Cu [22], Ag [26]
Ti ³⁺	Sn [28]

Registe-se o número restrito de redutores e o caso particular do Ti³⁺ empregue na deposição autocatalítica do Estanho. É ainda de notar que o uso de redutores com Fósforo e Boro, designadamente hipofosfito e aminoboranos, implica a formação de Metal-P (ou B), como acontece com o Cobalto e o Níquel. O teor de Fósforo e Boro nos depósitos é controlável por correcta adequação das condições operativas.

Os sais e complexantes vulgarmente usados estão indicados na Tabela 2.

TABELA 2

Agentes usuais em soluções *electroless*

METAL	SAL DO METAL	AGENTE COMPLEXANTE
Cu [29,30]	Sulfato	Tartarato de sódio e potássio EDTA
Co [3,31]	Sulfato, Cloreto	Citrato, Sais de amónio
Ni [32,33]	Sulfato, Cloreto	Sais de ácidos carboxílicos, Sais de amónio
Au [34]	Cianeto de ouro e potássio	Cianeto de potássio
Pd [21,35]	Cloreto	EDTA, Sais de amónio
Ag [36]	Cianeto de prata e sódio	Cianeto de sódio
As [24]	Trióxido de arsénio	Citratos, cianetos, sais de amónio
Sn [37]	Cloreto	Citratos, EDTA

O processo de deposição

Durante muito tempo, admitiu-se que a deposição *electroless* se processava de acordo com a teoria do potencial misto [29,38]. Actualmente reconhece-se a sua ineficácia para descrever a realidade mecânica do processo [39,40]. Embora existam sistemas em que os valores previsíveis por essa teoria são próximos dos observados experimentalmente – deposição do Cobre na maioria das soluções [41] – tal facto deve-se à especificidade das reacções em questão e não pode ser generalizado a todos os sistemas *electroless*.

De uma forma geral pode dizer-se que a química de um processo *electroless* é a do agente redutor que integra o banho. Assim, parecem infrutíferas as tentativas que têm sido efectuadas com a finalidade de estabelecer um mecanismo universal para a deposição *electroless* [42], devido à especificidade de cada agente redutor. Não obstante, pode assinalar-se um conjunto de fases de ocorrência obrigatória para que a deposição *electroless* aconteça:

1) Adsorção do agente redutor à superfície do metal a recobrir. Este fenómeno terá de ser suficientemente forte para provocar ruptura do agente redutor, fixando os radicais entretanto formados.

2) Esses radicais provocam a redução, à superfície do substrato, dos iões metálicos em solução, precipitando o metal.

3) O depósito metálico terá de ter capacidade para provocar a adsorção/quebra do agente redutor.

Ficam pois, mais claras as características da deposição ser autocatalítica e da selectividade apresentada. Com efeito, os metais depositados por *electroless* são na sua generalidade bons catalisadores para reacções de hidrogenação/desidrogenação, com elevada aptência para adsorver hidrogénio. De facto o radical \dot{H} forma-se quando as ligações do redutor são cindidas e irá reduzir os iões metálicos da solução. Igualmente o outro radical, simultaneamente formado, pode contribuir para a reacção. Para um caso particular, a Figura 2 esquematiza o mecanismo envolvido.

Convém salientar que os mecanismos específicos da oxidação de cada agente redutor não estão completamente esclari-

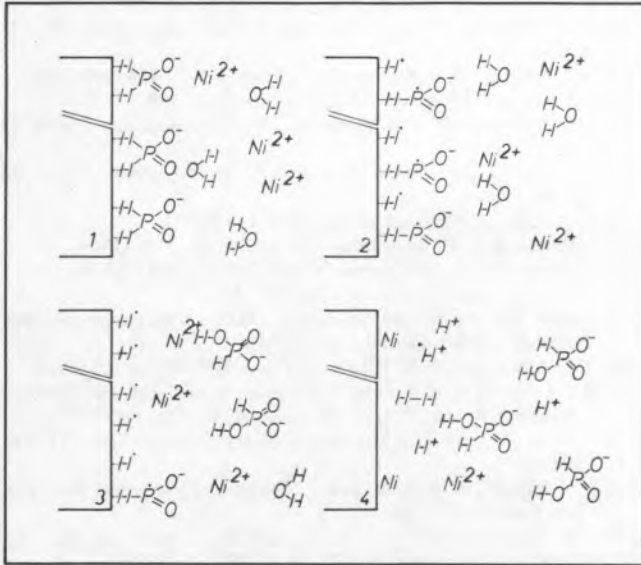


FIGURA 2

Esquema mecânico da electroless do Níquel usando Hipofosfito como agente redutor [20]

recidos, sendo a investigação neste domínio um assunto actual.

A qualidade dos depósitos

Os depósitos obtidos por *electroless* apresentam características de elevada uniformidade – espessura equivalente em todos os pontos onde houve contacto entre o substrato e a solução – aderência e fraca porosidade, garantindo-lhes melhor qualificação que os produzidos por via electroquímica tradicional para as mesmas condições de serviço. Verifica-se, assim, melhor resistência à corrosão e ao desgaste.

A oxidação do agente redutor, inerente à génese da formação dos depósitos, conduz à integração dos elementos, formando soluções sólidas com o metal, – por exemplo Ni-P (B) quando a solução comporta hipofosfito (dimetilaminaborano) –. Tal facto permite influenciar a estrutura e as propriedades físicas do depósito, variando o teor do elemento ou ainda por aplicação de tratamentos térmicos, particularmente no que se refere a:

- dureza
- resistência à abrasão
- ductibilidade
- resistividade eléctrica
- susceptibilidade magnética
- aderência
- resistência à corrosão.

Na Tabela 3 comparam-se algumas propriedades relevantes, de filmes finos vulgarmente utilizados, com películas de Ni-P *electroless*.

As aplicações

O Cobre *electroless* tem larga aplicação no fabrico de circuitos impressos e híbridos, metalização de plásticos e em blindagens electromagnéticas [43,44].

Os depósitos autocatalíticos de Cobalto, devido a notórias propriedades magnéticas têm interesse nas unidades de memória [45,46].

A principal aplicação do Paládio centra-se na indústria das comunicações, onde é usada para contactos. Poderá vir a ser

TABELA 3
Algumas propriedades de filmes finos sobre aço [7]

Propriedades	Ni-P electroless (14% at. P)	Ni electrofítico	Cr duro
DUREZA / HV ₁₀₀	500-600	150-400	800-1000
DUREZA/HV ₁₀₀ (após tratamento térmico-400 °C, 1h)	até 1100	150-400	–
TENSÕES INTERNAS / MPa	< 7	3-205	200-300
RESISTÊNCIA À CORROSÃO	muito boa	boa	boa

utilizado como barreira de difusão entre Ouro/Metal de forma a prolongar a vida dos depósitos de Ouro [35].

Naturalmente, o Níquel químico ocupa a primeira posição em termos quantitativos de produção, consequência da qualidade e propriedades notáveis dos respectivos depósitos. São conhecidas vastas aplicações nas indústrias Aeronáutica, Automóvel, Electrónica, Armamento, Nuclear, Petroquímica, devido à sua resistência à usura e corrosão [8]. Nos EUA, em 1984, mais de 1000 instalações produziram recobrimentos a Ni-P e na Europa, o maior produtor nacional, França, ultrapassou as 31 toneladas [7]. Estima-se que 70% da produção seja para recobrimento de Aço, 20% sobre Alumínio, 6% sobre Aço Inox e o restante dedicado a depósito sobre diversos metais.

Embora sem grande aplicação até ao presente, começam a surgir trabalhos relativos a depósitos *electroless* de Ferro [22], Rutério [47], Ródio [48], Bismuto [49] e Antimónio [50].

Com aspecto inovador, surge o campo fecundo de formação de ligas – Ni-Cu-P [51], Ni-P-B [52], Co-Ni-P [53], Co-Ni-Mn-P [54], Co-Ni-Mn-Re-P [55] e outras – com propriedades "talhadas" conforme as necessidades de aplicação e, em particular, a possibilidade de codepositar materiais inertes – Ni-P-PTFE [56].

A economia processual

Há uma certa tendência para assumir que a *Electroless* tem menores custos produtivos que a Electrodeposição tradicional, consequência lógica da eliminação do consumo energético na sua forma mais nobre (energia eléctrica).

Tal não é verdadeiro, pois os reagentes envolvidos são de preço elevado e os banhos de Deposição Autocatalítica têm uma degradação incomparavelmente superior aos de Electrodeposição.

Porém, em microeconomia, o que importa é a aptência de mercado para absorver o produto em termos de relação qualidade/preço. Assim, a Indústria centra-se na formação de depósitos destinados a fins exigentes e aplicações nobres e aplica-se activamente na optimização da química reaccional, base essencial de competitividade e de exercício em condições atractivas de rentabilidade.

Referências

- [1] L. F. Spencer, *Met. Finish.*, **72** (12), 58 (1978).
- [2] S. K. Doss, P. B. P. Phipps, *Plat. Surf. Finish.*, **72** (4), 64 (1985).
- [3] Y. H. Chang, C. C. Lin, M. P. Hung, T. S. Chin, *J. Electrochem. Soc.*, **133**, 985 (1986).
- [4] L. G. Bhatgadde, S. Mahapatra, *Solid State Technol.*, **26** (12), 181 (1983).

- [5] L. Lacourcele, *Pint. y Acabados*, **29** (159), 69 (1987).
- [6] W. T. Ferrar, D. F. O'Brien, A. Warshawsky, C. L. Voycheck, *J. Am. Chem. Soc.*, **110** (1), 288 (1988).
- [7] C. R. Shipley Jr., *Plat. Surf. Finish.*, **71** (6), 92 (1984).
- [8] M. Bottari, *Surfaces*, **164**, 52 (1984).
- [9] A. Brenner, G. Riddell, *J. Res. Nat. Bureau of Standards*, **37**, 31 (1946).
- [10] A. Brenner, G. Riddell, *J. Res. Nat. Bureau of Standards*, **39**, 385 (1947).
- [11] A. Brenner, *Modern Electroplating*, Ed. by F. A. Lowenheim, John Wiley & Sons, 2nd Ed.
- [12] J. Przyłuski, M. Kasprzak, J. Bielinski, *J. Surf. Coat. Technol.*, **31**, 203 (1987).
- [13] Y. Harada, K. Fushimi, S. Madokoro, H. Sawai, S. Ushio, *J. Electrochem. Soc.*, **133**, 2428 (1986).
- [14] A. M. Mance, R. A. Waldo, *J. Electrochem. Soc.*, **135**, 2729 (1988).
- [15] J. Gomes, "Novo banho de alta velocidade para deposição de Cobre electroless em circuitos impressos profissionais", rel. interno, EID, Monte da Caparica (1983).
- [16] A. P. F. Ricardo, "Estudo de catalisadores coloidais e soluções electroless para metalização selectiva em circuitos impressos", Relatório de Estágio, FCL/EID (1988).
- [17] J. L. Fang, *Huaxue Xuebao*, **41** (2), 129 (1983).
- [18] J. Loránth, A. Szász, Proc. 6th Galvanotech. Symp. [Votr.], 159 (1985).
- [19] J. P. Correia, L. M. Abrantes, 38th Meeting of ISE, paper 3.40, Maastrich, Holland (1987).
- [20] L. M. Abrantes, J. P. Correia, 40th Meeting of ISE, Kyoto, Japan (1989).
- [21] F. Pearlstein, *Modern Electroplating*, Ed. by F. A. Lowenheim, John Wiley & Sons, 3rd Ed. (1974).
- [22] G. Gutzeit, E. B. Saubestre, D. R. Turner, *Electroplating Engineering Handbook*, Ed. by A. K. Graham, 3rd Ed., Van Nostrand Reinhold Comp., N. Y. (1971).
- [23] P. R. Brookshire, Pat. 2, 976, 180 (USA) (1981).
- [24] H. L. Pinkerton, *Electroplating Engineering Handbook*, Ed. by A. K. Graham, 3rd Ed., Van Nostrand Reinhold Comp., N. Y. (1971).
- [25] J. F. Nuzzi, *Plat. Surf. Finish.*, **70** (1), 51 (1983).
- [26] A. Vaskelis, O. Diemontaite, *Liet. TSR Mokslu Akad. Darb.*, Ser. B, (4), 23 (1975).
- [27] R. F. Vines, R. H. Atkinson, F. H. Reid, *Modern Electroplating*, Ed. by Lowenheim, John Wiley & Sons, 3rd Ed. (1974).
- [28] K. J. Schmidt, M. Schmitz, Pat. 3, 322, 156 (RFA) (1985).
- [29] S. M. El-Raghy, A. A. Abo-Salama, *J. Electrochem. Soc.*, **126**, 171 (1979).
- [30] B. J. Feldman, O. R. Melroy, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 640 (1989).
- [31] I. Kiflawi, M. Schlesinger, *J. Electrochem. Soc.*, **130**, 872 (1983).
- [32] A. T. El-Mallah, M. E. A. El-Hassam, D. A. El-Sayed, *Med. Finish.*, **79** (12), 65 (1981).
- [33] C. E. Yamashiro, J. J. Podesta, A. J. Arvia, *An. Asoc. Quim. Argent.*, **74** (2), 119 (1986).
- [34] Y. Okinaka, *J. Electrochem. Soc.*, **120**, 739 (1973).
- [35] F. Pearlstein, R. F. Weightman, *Plating*, **56** (10), 1158 (1969).
- [36] F. Pearlstein, R. F. Weightman, *Plating*, **58** (10), 1014 (1971).
- [37] *El Estaño y sus Aplicaciones*, **128**, 10 (1981).
- [38] I. Ohno, T. Tsuru, S. Haruyama, Proc. of 10th World Congress on Metal Finishing - Interfinish 80 - 152 (1980).
- [39] A. Oni, R. Cottis, G. E. Thompson, *Trans. IMF*, **65** (3), 105 (1987).
- [40] B. J. Feldman, O. R. Melroy, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 640 (1989).
- [41] P. Bindra, J. Roldan, *J. Appl. Electrochem.*, **17**, 1254 (1987).
- [42] J. E. A. M. van den Meerakker, *J. Appl. Electrochem.*, **11**, 395 (1981).
- [43] E. K. Yung, L. T. Romankiw, R. C. Alkire, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 206 (1989).
- [44] C. H. Ting, M. Paunovic, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 456 (1989).
- [45] O. Takano, H. Matsuda, *Met. Finish.*, **83** (1), 63 (1985).
- [46] D. W. Baudrand, M. Malik, *Met. Finish.*, **84** (3), 15 (1986).
- [47] J. Valsiuniene, A. Norgailaite, *Liet. TSR Mokslu Akad. Darb.*, Ser. B, (2), 3 (1980).
- [48] A. Juravicius, J. Valsiuniene, *Zashch. Met.*, **21** (5), 774 (1985).
- [49] V. A. Larin, L. Y. Fodorov, K. I. Bubnov, *Khimiya i Tekhnol. Oksidn. Magnit. Materialov*, (4), 166 (1978).
- [50] Y. N. Fligontov, Pat. SU 1, 155, 389 (URSS).
- [51] A. Hung, K.-M. Chen, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 72 (1989).
- [52] C. K. Mital, P. B. Shrivastava, *Met. Finish.*, **84** (10), 67 (1986).
- [53] M. R. Khan, E. L. Nicholson, *J. Mag. Mag. Mat.*, **54-57**, 1654 (1986).
- [54] H. Matsubara, M. Toda, T. Sakuma, T. Homma, T. Osaka, Y. Yamazaki, *J. Electrochem. Soc.*, **136**, 753 (1989).
- [55] I. Koiwa, M. Toda, T. Osaka, *J. Electrochem. Soc.*, **133**, 597 (1986).
- [56] J. S. Hadley, L. E. Harland, *Met. Finish.*, **85** (12), 51 (1987).

37
Rb
85,47

RUBÍDIO, de **rubidus**, ou vermelho (cor dos seus sais à chama); descoberto em 1861. O rubídio é usado em células fotoelétricas e é um potente combustível espacial. Tal como o potássio, é levemente radioactivo e tem sido usado para localizar tumores cerebrais, uma vez que é absorvido por estes e não pelo tecido normal.

38
Sr
87,62

ESTRÔNCIO, de **Strontian**, Escócia; descoberto em 1790; é um metal raro e uma espécie de inimigo do cálcio orgânico. O estrôncio 90, radioactivo, é absorvido pelo tecido ósseo ao invés do cálcio e, em certa quantidade, destrói a medula e pode causar o cancro.

39
Y
88,91

ÍTRIO, de **Ytterby**, cidade da Suécia onde foi descoberto em 1794; é um metal laminoso, com brilho cinzento metálico. O ítrio 90 é radioactivo e usa-se em medicina em agulhas que substituíram outros instrumentos cirúrgicos na eliminação da transmissão da dor na espinal medula.

40
Zr
91,22

ZIRCÓNIO, de **zircão**, nome da pedra semi-preciosa, na qual foi descoberto em 1789. É um metal não afectado pelos neutrões; usa-se, por isso, como revestimento interior de reactores em submarinos nucleares. Como material de construção usa-se em aviões a jacto e foguetões.

Surpresas da Condensação de Michael *

Ana Paula Pereira Paiva ^a

Introdução

A condensação de Michael, descoberta há mais de cem anos, continua a apresentar alguns aspectos aparentemente incompreensíveis, não obstante o acumular de teorias, verificações e postulados a que tem dado origem.

Inicialmente introduzida como se representa na Figura 1, [1]

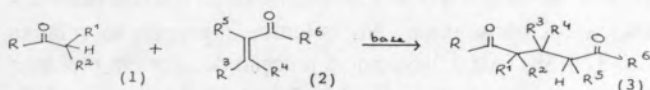


Figura 1
Condensação de Michael

desde cedo se constatou que o composto 1,5-dicarbonílico formado pode, nas mesmas condições que lhe deram origem, ser a base de um eficiente processo de síntese de compostos cíclicos – anelação de Robinson [2,3], Figura 2.

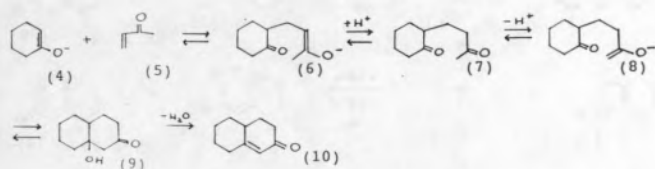


Figura 2
Anelação de Robinson

No entanto, a própria condensação de Michael pode originar directamente produtos cíclicos:

i) Se o dador e o aceitador de Michael estiverem incluídos na mesma molécula, (condensação de Michael intramolecular);
ii) Se se derem duas condensações de Michael seguidas, (dupla condensação ou condensação de Michael sequencial).
Para todos os casos é possível apontar alguns exemplos cujos resultados se podem considerar inesperados; todavia, considerações de ordem estereoquímica, de análise conformacional do estado de transição, do estudo cinético e dos efeitos estereoelectrónicos permitem dar justificação racional a muitos dos factos apresentados.

Anelação de Robinson

Em termos gerais, a ciclização aldólica posterior a uma condensação de Michael pode dar-se em dois sentidos, de acordo com a cetona que preferencialmente enoliza, Figura 3,

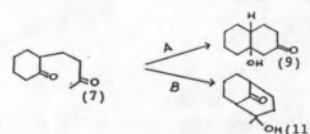


Figura 3
Ciclização aldólica

e de facto em muitas das condições usadas referidas na literatura obtiveram-se misturas dos dois tipos de ciclização. Repare-se na mudança de estereoquímica que se verifica nas ciclizações aldólicas dos aductos de Michael da ciclohexanona e da 2-metil-ciclohexanona [4], Figura 4.

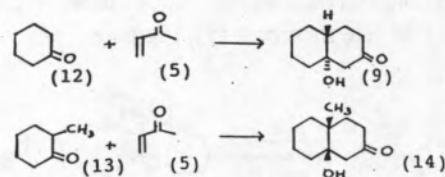


Figura 4
Cetóis da ciclohexanona e da 2-metil-ciclohexanona

Nestes casos, o efeito cinético devido à presença do substituinte na posição α em relação à cetona no aducto de Michael intermediário é determinante, uma vez que se forma o isómero menos estável e mais impedido, *cis*. Na ausência de impedimento estereoquímico, forma-se o isómero *trans* [5], Figura 5.

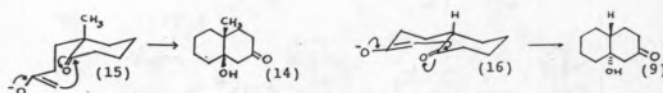


Figura 5
Formação dos cetóis *cis* e *trans*

Não deixa de ser também curiosa a formação exclusiva do isómero (18) na ciclização aldólica do aducto de Michael (17) [6]; no entanto, o tratamento ligeiro com base do isómero formado, (18), origina um seu epímero, (19), Figura 6.

^a Assistente no Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.

* Este artigo constitui um resumo da prova de capacidade científica apresentada para a passagem à categoria de Assistente segundo o artigo 58.º do Estatuto da Carreira Docente Universitária.

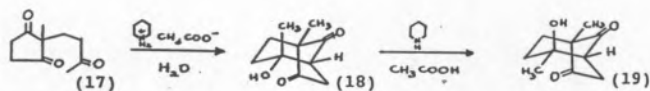


Figura 6
Ciclização aldólica do aducto (17)

Uma explicação plausível é a que se baseia na análise dos estados de transição conducentes a cada um dos epímeros, Figura 7,

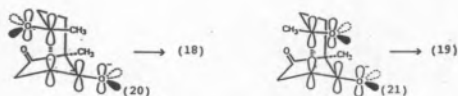


Figura 7
Estados de transição que originam (18) e (19)

que mostra que (20) é mais estabilizado por motivos electrónicos do que (21) [5] – há uma relação *antiperiplanar* entre a dupla ligação enólica atacante e o grupo carbonilo atacado em (20).

A ciclização sob pressão elevada, (15 000 atmosferas), de β -dicetonas e β -cetoésteres com aceitadores possuindo substituintes na posição β conduziu quase exclusivamente à formação de cetóis *tipo B*, (ver Figura 3), só se detectando a formação maioritária de um cetol *tipo A* quando o β -cetoéster é um anel de sete membros [7], Figura 8.

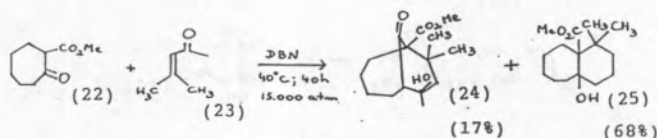


Figura 8
Ciclização sob pressão

Repare-se nos rendimentos significativamente diferentes da anelação de Robinson dos dois aductos de Michael representados a seguir [8], Figura 9.

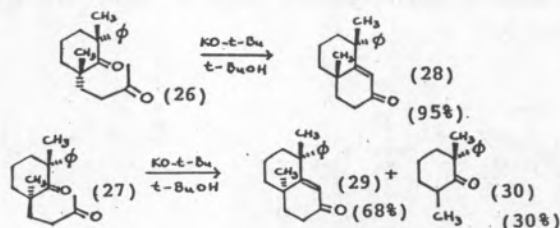


Figura 9
Anelação de Robinson de (26) e (27)

A formação da monocetona (30) a partir de (27) pode ser racionalizada se se atender a uma das conformações do aducto, (31), Figura 10,

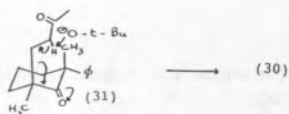


Figura 10
Uma das conformações de (27)

ou seja, se a cadeia lateral de butanona se encontrar em posição *axial*, há grande probabilidade de se dar a reacção retrógrada [8]; o mesmo não acontece com (26), (Figura 9), pois a conformação correspondente com a cadeia de butanona em posição *axial* é muito pouco favorecida, Figura 11.

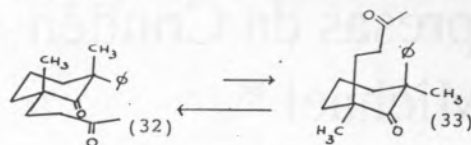


Figura 11
Conformações de (26)

Da reacção do 1-acetil-2-oxo-ciclohexano com a *trans*-3-penteno-2-ona, Figura 12,

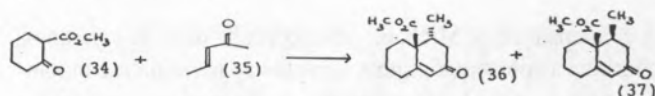


Figura 12
Anelação de Robinson de (34) com (35)

pode dizer-se que a obtenção exclusiva de um dos isómeros nunca foi conseguida. No entanto, a proporção relativa de (37)/(38) é de 3:1 quando a reacção decorre em presença de ter-amilato de potássio em álcool ter-amílico a -15°C e de 0,6:1 com metóxido de sódio em dimetilsulfóxido a 29°C [9].

Outra grande variação na proporção dos isómeros *cis/trans* é a que se verifica quando se faz reagir a 2-metil-ciclohexanona com a *trans*-3-penteno-2-ona [10], Figura 13,

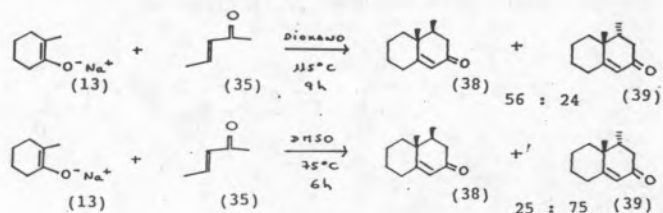


Figura 13
Reacção do enolato sódico de 2-metil-ciclohexanona com *trans*-3-penteno-2-ona em dioxano e dimetilsulfóxido

concluindo-se que o papel desempenhado pelo solvente neste tipo de reacção é deveras significativo.

Um caso particular muito importante da anelação de Robinson é a chamada reacção de Hajos-Parrish [11], Figura 14.

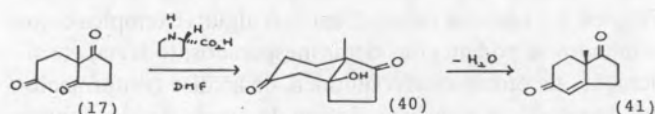


Figura 14
Reacção de Hajos-Parrish

Repare-se que o tratamento do aducto de Michael (17) com um reagente opticamente activo, a (S)-(-)-prolina, conduz à formação de um só enantiómero do cetol e do produto de desidratação, com excessos enantioméricos de 93,4% e 87,7%, respectivamente, sendo actualmente o mecanismo de catálise ainda motivo de controvérsia.

Não deixa de ser curioso, no entanto, que a (S)-homoprolina induza a quiralidade oposta ao mesmo substrato em condições idênticas [12], Figura 15, com excesso enantiométrico de 58%,

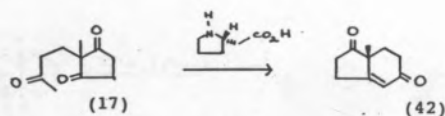


Figura 15

Reacção de Hajos-Parrish com (S)-homoprolina

e que N-anilidas correspondentes a cada um dos aminoácidos induzam a quiralidade oposta [12] à induzida pelo aminoácido respectivo, Figura 16, com excessos enantiométricos de 15 a 25%.

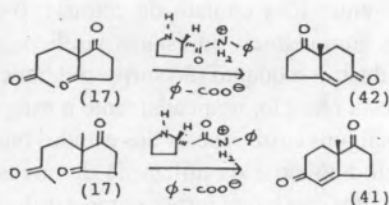


Figura 16

Reacção de Hajos-Parrish com as N-anilidas da (S)-prolina e (S)-homoprolina

Condensação de Michael intramolecular

Parece existir dois tipos de adição intramolecular de um anião a um aceitador de Michael que conduzem a resultados estereoquímicos diversos. No primeiro tipo, a insaturação electrofílica ou o anião estão incluídos num anel e pretende-se formar um novo anel, resultando a condensação em sistemas bicíclicos com fusão *cis* preferencial. No segundo tipo, as duas funções estão contidas numa cadeia linear e a condensação vai originar um anel que normalmente possui funcionalidade que permite a formação sequente de outro anel. Os sistemas bicíclicos que advêm deste tipo de condensação resultam de fusão *trans* preferencial.

Assim, a condensação de Michael dos substratos representados na Figura 17 originou sempre fusão *cis* [13], excepto para o substrato (44) quando $n=2$ e $n=3$, (proporção 1:1 *cis/trans* para os dois casos).

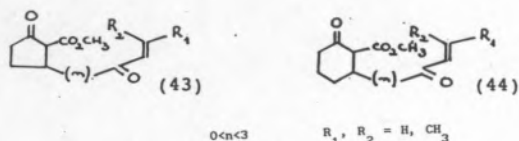


Figura 17

Condensação de Michael de substratos contendo a dupla ligação enólica num anel

Do mesmo modo, a condensação de Michael do substrato (45) resultou em (46) [14], Figura 18,

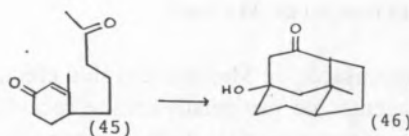


Figura 18

Condensação de Michael de (45)

só se podendo justificar a condensação aldólica posterior na fusão *cis* dos dois anéis.

Não se conseguiu estereoselectividade por tratamento dos substratos (47) e (48) com ter-butóxido de potássio em álcool ter-butílico; no entanto, verificou-se posteriormente que os respectivos quelatos metálicos conduzem à formação dos isómeros *trans* [15], Figura 19,

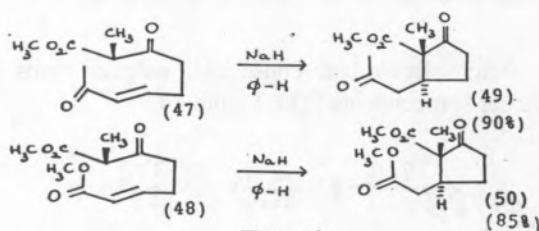


Figura 19

Condensação de Michael de substratos de cadeia linear

o que é explicável em termos da conformação preferida nos respectivos estados de transição [15], Figura 20.

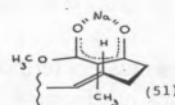


Figura 20

Estado de transição preferido pelo substrato (48)

Verificou-se estereoselectividade semelhante para o substrato (52) da Figura 21, em que o seu tratamento isolado com (R) e (S)-1-feniletamina conduziu à formação dos dois enantiómeros de fusão *trans* [16],

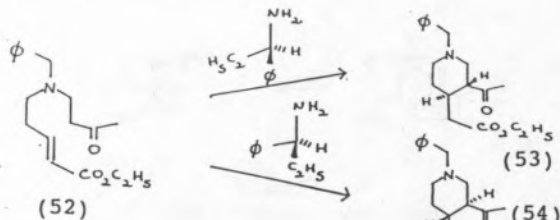


Figura 21

Condensação de Michael do substrato (52)

o que é novamente racionalizável em termos da conformação preferida pelo substrato [16] nos respectivos estados de transição, Figura 22.

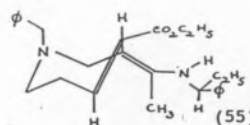


Figura 22

Estado de transição provável que leva à formação do isómero *trans*

Dupla condensação de Michael

A dupla condensação de Michael tem sido efectuada recorrendo a reagentes de uso relativamente recente, como os sililantes e a diisopropilamida de lítio, capazes de promover a formação de iões dienolato. O impedimento estereoquímico pode ser um factor limitativo desta reacção [17]. Figura 23,

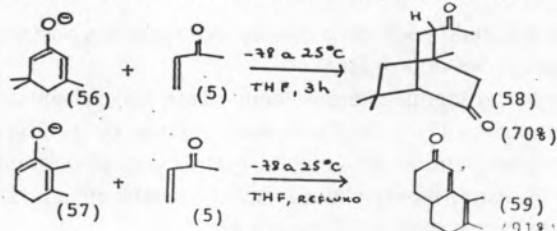


Figura 23

Dupla condensação de (56) e anelação de Robinson de (57)

mas a estereoselectividade conseguida nalguns casos não deixa de ser surpreendente [18], Figura 24,

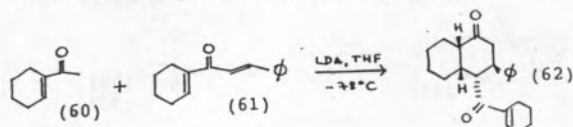


Figura 24

Dupla condensação de Michael de (60) com (61)

principalmente se se tiver em conta que a reacção de Diels-Alder do substracto (61) com o éter enólico sililado de (60) resultou na formação de (62) e de mais dois outros estereoisómeros [18].

Outros casos surpreendentes em termos de estereoselectividade são os apresentados nas Figuras 25 [19] e 26 [20],

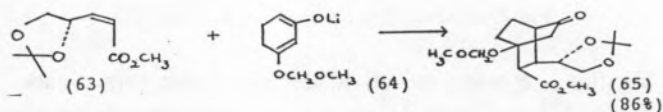


Figura 25

Dupla condensação de Michael de (63) e (64)

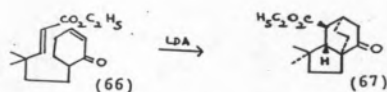


Figura 26

Dupla condensação de Michael de (66)

aos quais é atribuído ao catião lítio um papel relevante nos estados de transição.

Também há exemplos de estereoselectividade significativa no uso de derivados sililados [21], Figura 27.

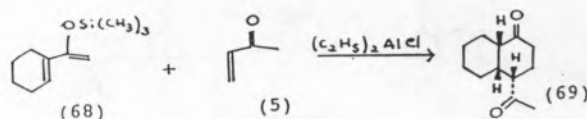


Figura 27

Dupla condensação de Michael de (68) com (5)

Conclusões

Neste trabalho recorreu-se a um número muito limitado de exemplos de condensação de Michael, – só foram analisadas reacções entre iões enolato de cetonas, β-dicetonas e β-cetoésteres com cetonas ou ésteres vinílicos, – mas eles bastam para ilustrar o quanto são surpreendentes muitos dos resultados desta reacção, nomeadamente a estereoselectividade obtida nalguns casos, apesar dos estudos recentes sobre equilíbrio ceto-enólico e da utilização de novos reagentes, como os sililantes e as bases fortes, como a diisopropilamida de lítio, capaz de promover a formação de iões dienolato.

Referências

- [1] Adam, R. et all, Organic Reactions, vol. X. J. Wiley and Sons, 179-555, 1959.
- [2] Jung, M., Tetrahedron, 32, 3, 1976.
- [3] Gawley, R., Synthesis, 777, 1976.
- [4] Marshall, J.; Fanta, W., J. Org. Chem., 29, 2501, 1964.
- [5] Deslongschamps, P., Stereoelectronic Effects in Organic Chemistry, vol. I, Pergamon Press, 1983.
- [6] Hajos, Z.; Parrish, D., J. Org. Chem., 39(12), 1612, 1974.
- [7] Dauben, W.; Bunce, R., J. Org. Chem., 48, 4642, 1983.
- [8] Ireland, R.; Kierstead, R., J. Org. Chem., 31, 2543, 1966.
- [9] Marshall, J.; Warne, T., J. Org. Chem., 36, 178, 1971.
- [10] Kikuchi, M.; Yoshikoshi, A., Bull. Chem. Soc. Jap., 54(11), 3420, 1981.
- [11] Hajos, Z.; Parrish, D., J. Org. Chem., 39(12), 1615, 1974.
- [12] Eschenmoser, A. et all, Helv. Chim. Acta, 61(8), 1978.
- [13] Berthiaume, G.; Lavallée, J.; Deslongschamps, P., Tetrahedron Lett., 27(45), 5451, 1986.
- [14] Johnson, W.; Shulman, S.; Williamson, K.; Pappo, R., J. Org. Chem., 27, 2015, 1962.
- [15] Stork, G.; Winkler, J.; Saccomano, N., Tetrahedron Lett., 24(5), 465, 1983.
- [16] Hirai, Y. et all, J. Am. Chem. Soc., 110, 958, 1998.
- [17] White, K.; Reusch, W., Tetrahedron, 34, 2439, 1978.
- [18] Richter, F.; Otto, H., Tetrahedron Lett., 26(36), 4351, 1985.
- [19] Nagaoka, H. et all, Tetrahedron Lett., 28(52), 6641, 1987.
- [20] Ihara, M. et all, J. Chem. Soc. Perkin-Trans I, 1155, 1988.
- [21] Hagiwara, H. et all, J. Chem. Soc. Chem. Comm., 1333, 1987.

Quimicando



A química pode ser entendida por alguns como uma brincadeira feita de cor, artifícios, explosões. Para outros, é um labirinto do qual não conseguem sair. Outros ainda associam-na a cabelos em pé, pessoas meio doidas!

Mas a Química é essencialmente uma Ciência muito importante e indispensável para todos nós. O espantoso mundo da Química, colorido e divertido, engloba, de entre muitos outros, um país igualmente interessante que todos decerto gostarão de conhecer – O PAÍS DAS REACÇÕES QUÍMICAS.

Que tal fazermos uma pequena viagem a este país?

Ao caminharmos pelas suas ruas fantásticas, apercebemo-nos que os seus habitantes – os reagentes – passeiam com os seus filhos – os produtos de reacção.

Há no entanto factos curiosos: os filhos, na maior parte das vezes, não têm quaisquer semelhanças com os seus pais. Por vezes, entre os cidadãos observam-se mudanças várias de aspecto. Para se evitar que hajam perturbações incontroláveis existem ruas seleccionadas – a Rua dos Ácidos, a Rua das Bases (onde se vê que a Sra. Fenolftaleína, ilustre senhora que distingue todos os moradores desta rua, estejam eles onde estiverem, faz corar os vizinhos), a Rua dos Cristais (a mais rica e luxuosa deste país) e outras. Finalmente, tal como em todos os países, existe a Penitenciária, onde estão os cidadãos mais perigosos – os produtos tóxicos.

Outro aspecto do qual nos apercebemos imediatamente é o seguinte – todos andam bem agasalhados, evitando o contacto com a luz, com a água, pois podem sofrer transformações e seria muito aborrecido se tivessem de mudar de rua!

É este um país rico, alegre, colorido, bonito, e que vale a pena visitar.

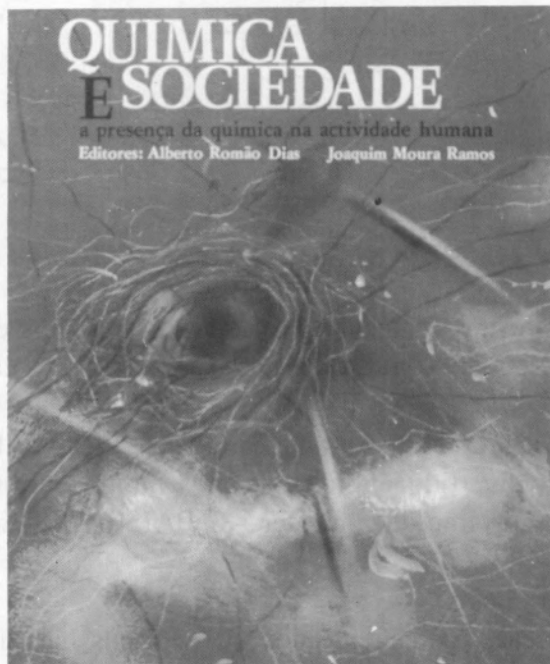
Se o quiserem conhecer, contactem a Quimicotecnia. Verão que vão gostar e não se arrependerão!
Até breve!

Ângela Ribeiro
(9.º ano Quimicotecnia da Escola Secundária da Camarinha)

NOVIDADE

QUÍMICA E SOCIEDADE

A PRESENÇA DA QUÍMICA NA ACTIVIDADE HUMANA



ÍNDICE

A Evolução Química no Espaço e no Sistema Solar e o Problema da Origem da Vida
Joaquim J. Moura Ramos

A Evolução Química na Terra e o Problema da Origem da Vida
Hernâni Maia

Moléculas da Vida
Ana Lobo

Química e Saúde
Eduarda Rosa e Fátima Norberto

Química e Pré-História: A Datação pelo Radiocarbono
J.M. Peixoto Cabral

Fotografia: da Magia à Química-Física
Eurico C. Melo

A Química na Arte
Maria Alzira A. Ferreira

Química e o Aumento das Produções Agrícolas
Joaquim Quelhas dos Santos

A Química e a Alimentação: A Química na Cozinha
Vera F. Sá da Costa

Um livro indispensável para todos os interessados no papel da Química na vida da Sociedade

SÓCIOS SPQ
1000\$00

À VENDA NAS LIVRARIAS
1800\$00

UMA PUBLICAÇÃO CONJUNTA DA

SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

E DA

LIVRARIA ESCOLAR EDITORA

EDITORES:

A. ROMÃO DIAS E J. MOURA RAMOS

COM O APOIO DA JNICT

Química; Crime; Sociedade
António Pinho de Aguiar

NOME _____

MORADA _____

Sou sócio da SPQ e desejo receber um exemplar do livro **QUÍMICA E SOCIEDADE** para o que envio o cheque N^o _____

do Banco _____, no valor de 1000\$00, em nome da **Sociedade Portuguesa de Química**, Av. da República, 37 - 4^o - 1000 Lisboa

Interacção de Iões Tiocianato e Perclorato em Meio Ácido

M. Madalena Humanes^a
António Negrão^a

O perclorato de sódio é utilizado frequentemente para a manutenção da força iónica em soluções destinadas ao estudo cinético. No entanto, em certas condições, pode dar origem a reacções interferentes.

Procuramos estabelecer as condições em que se dá a reacção redox entre perclorato e tiocianato de sódio, em meio ácido, que pode conduzir, inclusivamente, à decomposição dos reagentes.

Introdução

O uso do sistema $\text{NaClO}_4/\text{HClO}_4$ é frequente no estudo cinético de reacções envolvendo espécies iónicas, a fim de controlar a força iónica e, dentro de certos limites, a acidez do meio.

Ao estudarmos a reacção da anionação entre o perclorato $\alpha\beta$ anti-aquo [1,9 bis(2'piridilo)2,5,8triazanonano]cobalto (III) e o ião tiocianato [1], verificamos que, ao utilizarmos o tampão atrás descrito, podíamos obter reacções secundárias que alteram por completo os iões reagentes, provocando reacções secundárias que tivemos de evitar.

Através de um estudo baseado na identificação dos produtos

obtidos, procuramos interpretar as diferentes reacções que podem ocorrer.

Parte experimental

Utilizamos reagentes de grau analítico, que não submetemos a qualquer tratamento posterior, excepto a secagem em estufa a 110 °C do perclorato e tiocianato de sódio, durante 48 horas.

A concentração do ácido perclórico e das soluções de perclorato de sódio foi determinada por titulação potenciométrica. Uma descrição sumária das experiências realizadas, encontra-se na Tabela I.

Estas observações experimentais suscitam algumas questões:

i) Poderá a cor rosa observada nas experiências 1, 2, 3, 5, 6 e 7 ser explicada pela formação de polímeros $(\text{NCS})_x$?

ii) A solução 4 é incolor. Não haverá reacção nestas condições?

iii) Qual a(s) espécie(s) responsável pela solução amarelo-esverdeada nas experiências 5 e 6?

iv) O precipitado amarelo-pálido obtido nas experiências 5 e 6 poderá ser enxofre?

A fim de respondermos à questão i) traçamos os espectros de VIS-UV entre 280-520nm que se apresentam na Figura 1,

TABELA I
Sumário das experiências realizadas

EXPERIÊNCIA	$[\text{HClO}_4]$	$[\text{NaNCS}]$	OBSERVAÇÕES EXPERIMENTAIS
1	1.0 M	0.5 M	Solução rosa pálido (formação instantânea de cor)
2	0.05 M	0.5 M	Solução rosa pálido (formação instantânea de cor)
3	1.0 M	0.075 M	Solução rosa pálido (formação instantânea de cor)
4	0.05 M	0.075 M	Solução incolor
5	60% (w-w) 2 partes	Satur. 1 parte	Sol. rosa intenso (form. inst. cor-dura pouco tempo) → Sol. amarelo-esverdeada (minutos) → pp. amarelo pálido + gases abundantes
6	60% (w-w) excesso	cristais	Sol. rosa intenso em torno dos cristais (form. inst. cor, dura segundos) → sol. amarelo-esverdeada (minutos) → pp. amarelo pálido + gases abund.
7	60% (w-w) só cobrir cristais	cristais	Sol. laranja int. (form. inst., dura segundos) → sol. sobrenadante verm. + sol. leitosa inferior, dura segundos → sol. amar. + pp. verm. escuro (abund.) + susp. amar-laranja → form. gases (lenta)

^a Centro de Electroquímica e Cinética da Universidade de Lisboa no Instituto Rocha Cabral, Departamento de Química da Faculdade de Ciências de Lisboa

para os vários intervenientes na reacção, utilizando água tridestilada como branco. Se considerarmos que a extensão da reacção entre o HClO_4 e o NaNCS só se dá em pequena escala nas condições experimentais, podemos interpretar os resultados como a soma do espectro do ião tiocianato com o espectro do polímero.

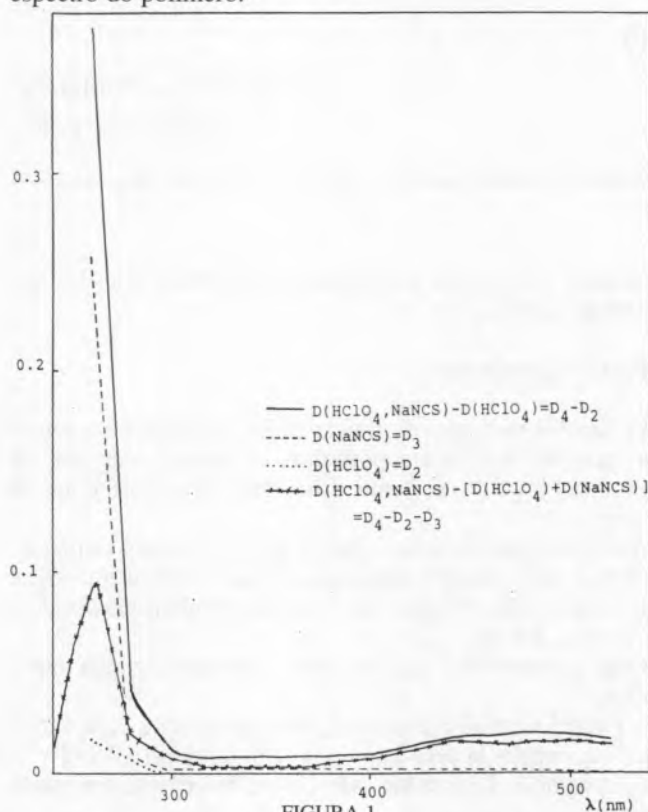
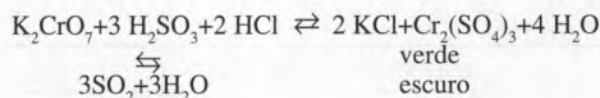
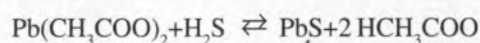


FIGURA 1
Espectros dos vários componentes da mistura reaccional

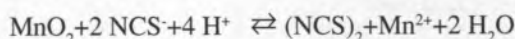
A resposta à questão ii) não pode ser dada inequivocamente. Para dar resposta à questão iii) realizaram-se testes para identificação do H_2S e do SO_2 [2] que se baseiam nas seguintes reacções:



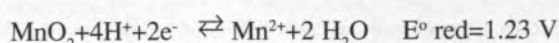
Os resultados destes testes encontram-se na Tabela II. O precipitado obtido nas experiências 5 e 6 é enxofre, como se verificou através das suas propriedades físicas (fusão e sublimação).

Interpretação de resultados

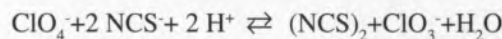
Este conjunto de experiências permite-nos tirar algumas conclusões interessantes. O tiocianogénio (NCS)₂ pode formar-se por oxidação do ião tiocianato com dióxido de manganês [3]:



Este esquema químico pode ser decomposto nas seguintes reacções:



O ião ClO_4^- faz parte do par redox $\text{ClO}_4^-/\text{ClO}_3^-$ ($E^\circ \text{ red} = 1.19 \text{ V}$) [4], semelhante ao do par redox $\text{MnO}_2/\text{Mn}^{2+}$ ($E^\circ \text{ red} = 1.21 \text{ V}$) o que nos leva a considerar que o primeiro par pode também oxidar o tiocianato a tiocianogénio:

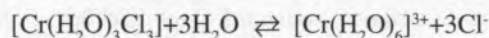
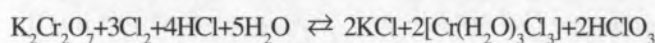
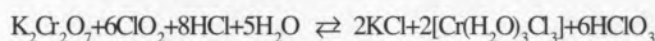
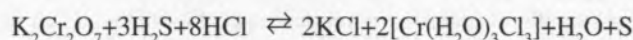


O facto da reacção ser energeticamente favorável não implica que ela possa ocorrer a uma velocidade mensurável, isto é, pode ser muito lenta, bastando para tal, que a energia de activação do processo seja muito elevada.

GOULD [5] afirma que a redução do perclorato a clorato, a frio, é extremamente lenta em soluções diluídas de HClO_4 com redutores como o iodeto de potássio e o $\text{Fe}(\text{II})$. O mesmo autor afirma que o tiocianogénio só é estável a baixas temperaturas e que à temperatura ambiente polimeriza $(\text{NCS})_x$ precipitando na forma de uma massa vermelha, quando x é suficientemente grande.

O aumento de absorção na região dos 400-520 nm pode ser consistente com a transmissão de uma cor rosa, significando que se formam pequenas quantidades de $(\text{NCS})_x$ em que a absorvidade molar dos polímeros é grande. De qualquer modo, os resultados experimentais indicam que $\epsilon_{(\text{NCS})_x} > x \cdot \epsilon_{\text{NCS}^-}$ para qualquer comprimento de onda, pois de outro modo não se poderia registar o aumento de absorvância verificado quando se passa da curva D_3 vs λ para $D_4 - D_2$ vs λ .

O seguinte conjunto de reacções pode explicar o conjunto de testes negativos do dicromato:

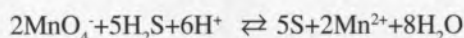


Assim, os testes negativos servem para confirmar o resultado positivo do teste do acetato de chumbo, mas não servem para identificar inequivocamente ClO_2 e/ou Cl_2 .

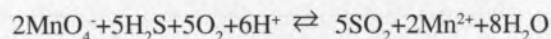
As soluções 5 e 6 apresentavam, a dada altura, um cheiro a leixívia, o que pode indicar que durante a reacção se forma ácido hipocloroso e/ou cloro. A solução apresenta também uma cor esverdeada, que poderia resultar da dissolução do cloro formado.

O malogro da detecção do SO_2 pode ter sido devido à interferência da reacção com H_2S e/ou ClO_2 ou Cl_2 .

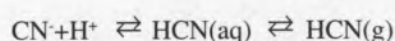
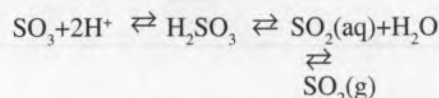
O teste do permanganato, que permite também detectar o dióxido de enxofre não se realizou devido a que, em meio ácido, como o teste requer, ocorrem interferências com o H_2S :



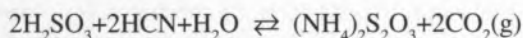
ou



Na reacção entre o HClO_4 e o NaNCS podemos ainda considerar que se forma HSO_3^- e CN^- , mas em meio ácido devem ocorrer ainda, as reacções:



Mas, as quantidades de $\text{SO}_2(\text{g})$ e $\text{HCN}(\text{g})$ que se podem libertar devem ser mínimas, pois na mistura reaccional pode ocorrer a seguinte reacção:



que consome os ácidos formados, impedindo a libertação de gases.

Esta reacção é relativamente rápida quando comparada com as reacções que produzem H_2SO_3 e HCN .

O precipitado abundante, formado no decurso da experiência 7 deve ser o polímero $(\text{NCS})_x$.

Algum tempo depois, verifica-se o aparecimento de uma suspensão amarelo-alaranjada. Esta alteração deve-se, provavelmente, ao facto deste polímero ser atacado por espécies oxidantes que o vão desagregando e formando enxofre na sua superfície.

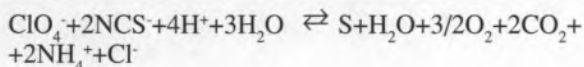
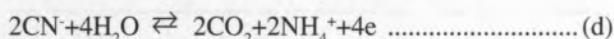
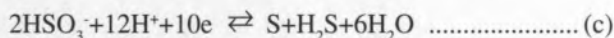
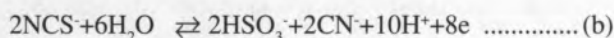
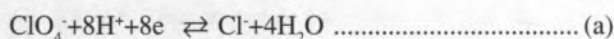
A formação do precipitado de $(\text{NCS})_x$ na experiência 7 e a formação instantânea da cor rosa intensa nas experiências 5 e 6 parece indicar que o primeiro passo das reacções entre o HClO_4 e o NaNCS deve ser a oxidação do tiocianato a tiacianogénio:



e que nas experiências 5 e 6 não se verificou a formação do precipitado vermelho-escuro porque deveriam existir condições para que o $(\text{NCS})_2$ reagisse mais rapidamente por uma via distinta da reacção de polimerização.

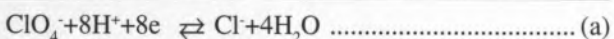
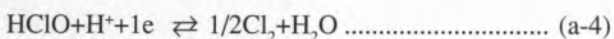
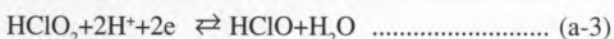
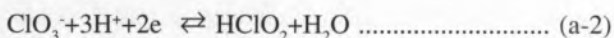
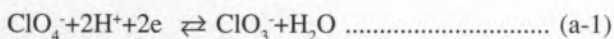
O conjunto de todos os resultados experimentais indica que nas experiências 5 e 6 o HClO_4 é capaz de ser reduzido até Cl_2 (e possivelmente até Cl^-) e que o NCS^- é passível de ser oxidado até à formação de S , H_2S e NH_4^+ (e possivelmente CO_2).

A seguinte combinação de "semi-reacções" poderia explicar grosseiramente o que se passa nas experiências 5 e 6:

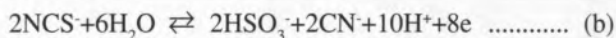
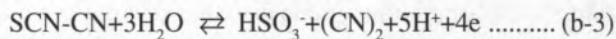
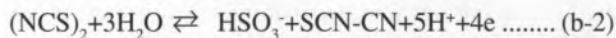


À excepção da reacção (e) todas as outras são susceptíveis de serem decompostas em processos mais simples:

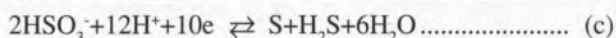
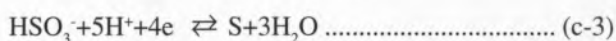
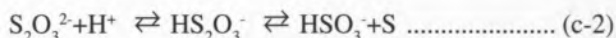
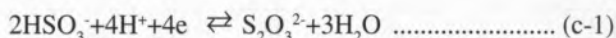
Reacção (a)



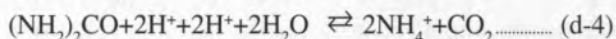
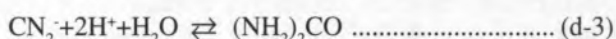
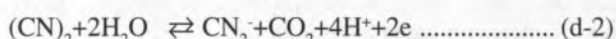
Reacção (b)



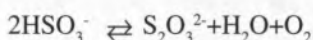
Reacção (c)



Reacção (d)

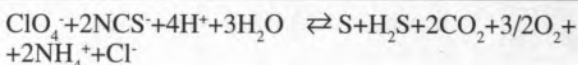
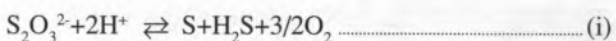
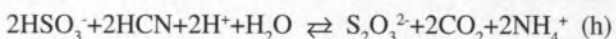
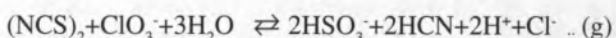
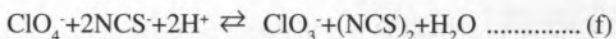


Note-se que as reacções (a) e (c) são conjuntos de reduções sequenciais e que a formação de enxofre pode ocorrer ciclicamente, através dos processos:



onde a primeira destas reacções resulta da soma do processo (c-1) com o processo (e).

Agrupando os vários processos mais simples entre si pode obter-se o seguinte conjunto de reacções globais de oxidação-redução:



A descrição do processo químico que apresentamos serve para salientar a complexidade da reacção entre o HClO_4 e o NaNCS , fornecendo-nos uma ideia dos intermediários possíveis e dos produtos que previsivelmente se obtêm, para além dos que conseguimos identificar experimentalmente. Esta expli-

cação poderá não ser completa, mas é aquela que nos parece mais credível, face aos resultados experimentais.

Testes mais ou menos selectivos poderiam ter sido realizados, mas implicariam o uso de grandes concentrações de reagentes, o que nos parece de interesse relativamente reduzido, visto afastarmo-nos muito das condições das experiências cinéticas. Constatamos, no entanto, que é extremamente importante a relação das concentrações de HClO_4 e NaNCS .

radas e/ou ocorrer a uma velocidade menor do que em meio ácido.

As experiências realizadas indicam que a oxidação do tiocianato a tiocianogénio pode ocorrer a concentrações superiores a 0.05 M de ácido e 0.075 M de tiocianato de sódio. Nestas condições, não se verifica qualquer formação de cor, o que mesmo em pequena extensão, reforça a afirmação de que o ácido perclórico, apesar de ser um oxidante forte para com-

TABELA II
Resultados dos testes de identificação

EXPERIÊNCIA	TESTE		CONCLUSÕES
	ACETATO DE CHUMBO	DICROMATO DE POTÁSSIO	
5	papel enegrece	papel violeta com auréola amarela	H_2S presente ClO_2/Cl_2 possíveis
6	papel enegrece	papel violeta com auréola amarela	H_2S presente ClO_2/Cl_2 possíveis
7	papel não enegrece antes da formação pp. verm. papel enegrece lentamente ao formar pp. verm.	sem alteração antes da form. pp. verm. papel violeta c/auréola amarela após formar pp. verm.	$\text{H}_2\text{S}/\text{ClO}_2/\text{Cl}_2/\text{SO}_2$ ausentes H_2S presente ClO_2/Cl_2 possíveis

Por exemplo, nas experiências 5, 6 e 7 obtém-se uma cor rosa intensa em torno dos cristais, que atribuímos à formação de $(\text{NCS})_x$ e que nas experiências 1, 2 e 3 se forma apenas, uma cor rosa pálida; podemos presumir que há duas vias distintas para a obtenção daqueles polímeros:

i) Nas experiências 5 e 6, onde a quantidade de HClO_4 é bem maior do que a de NaNCS , dá-se a formação rápida de $(\text{NCS})_2$ que polimeriza a $(\text{NCS})_x$, mas o meio continua suficientemente ácido para que as reacções (g), (h) e (i) possam ocorrer, competindo com a reacção de polimerização;

ii) Na experiência 7, onde a quantidade de HClO_4 é semelhante ou ligeiramente menor do que a quantidade de NaNCS , continua a dar-se uma formação inicial rápida de $(\text{NCS})_2$ e $(\text{NCS})_x$, mas como o ácido é praticamente todo utilizado, todas as reacções subsequentes podem ser alte-

postos orgânicos em soluções aquosas diluídas, à temperatura ambiente reage muito lentamente com compostos inorgânicos [5,6].

Referências

- [1] HUMANES, M. Comunicação XXVI International Conference on Coordination Compounds, Porto, 1988
- [2] KING, E.J. "Qualitative Analysis and Electrolytic Solutions", Oliver & Boyd, Londres, 1962
- [3] HUHEEY, J.E. "Inorganic Chemistry – Principles of structure and reactivity", 3ª ed., Harper & Row, Nova Iorque, 1983
- [4] HANDBOOK OF CHEMISTRY AND PHYSICS, 53ª edição, CRC Press, 1973
- [5] GOULD, E.S. "Inorganic reactions and structure", Holt, Rinehart & Winston, Nova Iorque, 1962
- [6] MAHAN, B.H. "Química – um curso universitário", 2ª edição, Edit. Blis, São Paulo, 1976

41

Nb

92,906

NIÓBIO, de **Niobe**, filha do rei mítico grego Tantalos (o nióbio foi descoberto conjuntamente com o tântalo); descoberto em 1801. Usa-se em reactores atômicos, motores de aviões a jacto e foguetões. Até 1950 foi conhecido como Columbio, de Columbia – o nome poético da América, onde o seu minério foi primeiro descoberto.

42

Mo

95,94

MOLIBDÉNIO, de **molybdos**, ou chumbo (o molibdénio foi encontrado inicialmente no que se pensou ser minério de chumbo; descoberto em 1778. Tem o quinto mais elevado ponto de fusão de entre os metais. É usado em filamentos, caldeiras e canos de fuzis. Só em 1959 foi inventado um recipiente, um cadinho com água arrefecida, para o fundir.

43

Tc

(98)

TECNÉCIO, de **technetos** ou artificial; produzido em 1937. Primeiro elemento produzido pelo homem, originalmente pelo bombardeamento atômico do molibdénio; encontrou-se, mais tarde, entre os produtos da fissão do urânio.

Um Curso Prático de Cinética Química

3. Análises de correlação: efeito de solvente

Lídia M.P.C. Albuquerque^aRaquel M.C. Gonçalves^a

Um curso de Cinética Química, no ensino universitário, tem como objectivo primeiro a determinação de ordens, velocidades específicas e funções termodinâmicas de activação [1, 2]; e tem por objectivo último conduzir os alunos a atingirem um estágio de conhecimento experimental e teórico que lhes permita propôr ou testar mecanismos reaccionais.

Com esta finalidade sugere-se neste trabalho que se estude um dado sistema reaccional em diferentes solventes – a solvólise do cloreto de butilo terciário em água e em oito monoalcoóis –, se submeta o conjunto de valores experimentais a um tratamento matemático e se procure relações empíricas que, posteriormente, serão interpretadas quer em termos de mecanismos de interacção quer de propriedades moleculares. Assim, para a descrição do comportamento cinético de qualquer sistema reaccional é necessário que se conheça os diversos modelos qualitativos e quantitativos, os seus domínios e condições de aplicabilidade a valores experimentais e, como eles, porventura, se intercalam e complementam numa perspectiva unificadora.

Em suma, pretende-se que os alunos, através de um ou mais modelos apropriados a um dado sistema reaccional, façam o elo de ligação entre a observação (a nível macroscópico) e as interpretações mecanísticas (a nível microscópico).

Em Cinética para se obter informações mecanísticas recorre-se frequentemente ao estudo do efeito do solvente na velocidade das reacções.

Os primeiros trabalhos neste domínio datam de há mais de um século [3]; porém, um tratamento universal que descreva, de um modo completo, as contribuições do meio nas reacções em solução está longe de ter sido atingido. No entanto, nas últimas décadas tem-se tentado formular modelos empíricos para a descrição das relações entre estrutura e reactividade [4, 5].

Esta abordagem do problema designa-se por «Análises de Correlação» e constitui uma quantificação do clássico princípio químico da analogia [6].

Este método de análise, aplicado ao efeito do solvente, consiste em estudar uma dada reacção em diferentes solventes e correlacionar as suas constantes de velocidade, k , (quer como $\log k$ quer como $\Delta^\ddagger G$) com parâmetros do solvente que descrevam as interacções deste com o soluto. Em geral, estas correlações são tão difíceis como importantes, pois as alterações estruturais entre os solventes podem ser muito grandes bem como os mecanismos de interacção muito diversos.

Os parâmetros do solvente

A interpretação do efeito do solvente nos processos químicos tem sido feita, quase exclusivamente, em termos de «polaridade» do solvente. Este conceito, carecendo ainda hoje de uma definição exacta, é de fácil compreensão e de difícil caracterização. Reichardt [5] definiu-o como a soma de todas as propriedades moleculares responsáveis por todas as forças de interacção entre as moléculas do soluto e do solvente (coulombicas, indutivas, de dispersão, de ligação de hidrogénio, de transferência de carga, etc.). É evidente que a «polaridade» do solvente, assim definida, não pode ser descrita por um único parâmetro físico macroscópico (por exemplo, constante dieléctrica, ϵ , momento dipolar, μ , índice de refração η) visto que é impossível caracterizar com um só parâmetro as complexas interacções soluto-solvente a nível molecular.

Compreende-se, deste modo, por que as teorias electrostáticas [7], descrevendo a solvatação electrostática por equações dependentes de $f(\epsilon)$ ou de $f(\eta^2)$, tenham tido insucessos. Por outro lado, assiste-se a um crescente uso de escalas empíricas de polaridade cujos parâmetros são baseados num processo físico ou químico de referência (reacção padrão ou propriedade físico-química de uma substância padrão). O processo modelo funciona como uma sonda na esfera de solvatação da substância padrão e, conforme o processo seleccionado, assim se obtêm diversos parâmetros empíricos os quais reflectem as interacções específicas soluto-solvente na região cibatática ou coesfera do solvente. Quando se aplicam estes parâmetros ao estudo do efeito do solvente numa dada reacção, está implícito que as interacções soluto-solvente são similares às forças intermoleculares no processo de referência.

Constata-se que existem muitas escalas empíricas de polaridade [4, 5] deduzidas de medidas cinéticas (constantes de velocidade), termodinâmicas (constantes de equilíbrio, K , variações de entalpia, ΔH) ou espectroscópicas (variações solvatocrómicas, $h\nu$) tendo sido as primeiras propostas, respectivamente, a escala Y de Grunwald e Winstein [8], em 1948, a escala L de Meyer [9], em 1914, e a escala Z de Kosower [10] em 1958. Todavia, a mais largamente usada e a mais versátil nas condições experimentais (variação do solvente, do substituinte, da temperatura e da pressão) é a

^a CECUL – Departamento de Química da Faculdade de Ciências de Lisboa, Calçada Bento da Rocha Cabral, 14, 1200 Lisboa.

escala espectroscópica E_T proposta por Dimroth e Reichardt [11] em 1963. Este parâmetro, expresso em kJ mol^{-1} , baseia-se nas energias de transição molar para a banda de absorção, no UV/VIS, da transferência de carga intramolecular correspondente à transição electrónica $\pi - \pi^*$ de uma betaína de N-fenóxido de piridínio num dado solvente, a 25 °C. $E_T = h c \tilde{\nu} N_A$ sendo h a constante de Planck, c a velocidade da luz, $\tilde{\nu}$ o número de onda do fotão que produz a transição electrónica e N_A o número de Avogadro. Recentemente [5], tem sido recomendado o uso do parâmetro de Dimroth e Reichardt normalizado, E_T^N , cuja escala adimensional é definida por

$$E_T^N = \frac{E_T - 30,7}{32,4}$$

(1 para água e 0 para o tetrametilsilano), e, tal como o E_T , caracteriza quantitativamente a electrofilia ou acidez de Lewis do solvente. Na Tabela 1 apresenta-se, como exemplo, os valores de alguns parâmetros de polaridade para um conjunto de solventes seleccionado.

TABELA 1
Parâmetros empíricos de polaridade do solvente a 25,0 °C

SOLVENTE	ϵ^a	η^a	$E_T^N{}^b$
água	78,30	1,3330	1,000
metanol	32,66	1,3284	0,762
etanol	24,55	1,3614	0,654
1 - propanol	20,45	1,3856	0,617
2 - propanol	19,92	1,3772	0,546
1 - butanol	17,51	1,3993	0,602
2 - butanol	16,56	1,3971	0,506
2 - metil-1-propanol	17,93	1,3959	0,552
1 - pentanol	13,9	1,4100	0,568

^a Valores apresentados na ref. [12]

^b Valores apresentados na ref. [5]

Apesar dos parâmetros de polaridade aqui apresentados, e muitos outros não referidos, serem obtidos de processos independentes e bastante distintos, podem estar relacionados entre si [4, 5]. A existência destas correlações, que pode ser verificada gráfica ou analiticamente, contribui para uma melhor compreensão do significado físico-químico dos parâmetros envolvidos; no entanto, parâmetros colineares não devem ser usados numa mesma equação multiparamétrica.

O método: da observação à interpretação

Correlação de constantes de velocidade com parâmetros do solvente

No estudo cinético de reacções em solução, para descrever quantitativamente o efeito do solvente, tem-se tentado correlacionar a constante de velocidade ($\log k$ ou $\Delta^\ddagger G$) com parâmetros do solvente através de equações uni e multiparamétricas [4, 5].

Como se disse anteriormente, para ilustrar este procedimento escolheu-se a reacção de solvólise do cloreto de butilo terciário em nove solventes hidroxílicos.

Aplicação

Determinação da constante de velocidade da metanólise do t-BuCl nas seguintes condições experimentais: $[t\text{-BuCl}]_0 = 0,01 \text{ mol dm}^{-3}$ e $T = 25,0 \text{ °C}$.

1 – Para seguir a evolução da reacção ao longo do tempo utilize a técnica conductimétrica [1, 2, 13].

2 – Para calcular a constante de velocidade use um método de intervalo de tempo constante [1, 13, 14].

3 – Estime o valor mais provável de k bem como o respectivo desvio padrão, σ_k , aplicando uma análise de regressão simples pelo método dos mínimos quadrados [15].

4 – Compare o valor obtido com o apresentado na Tabela 2.

Na Tabela 2 encontram-se os valores seleccionados de constantes de velocidade para a solvólise do cloreto de butilo terciário, a 25 °C, os quais vão ser objecto de análises de correlação.

TABELA 2

Constantes de velocidade da reacção de solvólise de t-BuCl em diferentes solventes a 25,0 °C

SOLVENTE	k / s^{-1}
água	$2,88 \times 10^{-2}$
metanol	$8,71 \times 10^{-7}$
etanol	$8,51 \times 10^{-8}$
1 - propanol	$4,68 \times 10^{-8}$
2 - propanol	$1,58 \times 10^{-8}$
1 - butanol	$3,02 \times 10^{-8}$
2 - butanol	$7,94 \times 10^{-9}$
2 - metil-1-propanol	$5,01 \times 10^{-9}$
1 - pentanol	$3,55 \times 10^{-8}$

^a Valores apresentados na ref. [16]

i) Correlações uniparamétricas

A equação de correlação de uma propriedade A dependente do solvente com um parâmetro do solvente, X_1 , é na sua forma mais simples

$$a = a_0 + a_1 X_1$$

onde A pode ser $\log k$, $\log K$ ou uma propriedade espectroscópica e X_1 um parâmetro de polaridade representando a contribuição principal da influência do solvente na reactividade.

Aplicação

Com base nos valores das Tabelas 1 e 2, é possível testar diversas equações uniparamétricas.

1 – Trace os gráficos de $\log k$ em função de cada um dos seguintes parâmetros do solvente:

- função de Kirkwood da constante dieléctrica, $(\epsilon-1)/(2\epsilon+1)$, medida da polarização do solvente;
- função do índice de refração, $(\eta^2-1)/(\eta^2+2)$, medida da polarizabilidade do solvente;
- parâmetro de Dimroth e Reichardt normalizado, E_T^N , medida do poder doador de ligações de hidrogénio do solvente.

2 – Estime os parâmetros a_0 e a_1 , o coeficiente de correlação r , e o desvio padrão, σ , do ajuste, para cada caso, utilizando uma análise de regressão linear simples.*

3 – Examine as figuras, compare-as e, juntamente com os valores dos parâmetros das regressões, tire conclusões sobre o comportamento da solvólise do cloreto de butilo terciário.

ii) Correlações multiparamétricas

Embora se verifique, em alguns casos, uma boa descrição quantitativa de valores experimentais usando equações com um único parâmetro ajustável, existem muitos outros em que tal não acontece. Por este facto, a partir de finais da década de 60, tem-se procurado usar equações multiparamétricas do tipo:

$$A = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i X_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

onde X_i são os valores dos parâmetros do solvente (em princípio, independentes mas complementares) que descrevem os diferentes mecanismos de interacção entre o solvente e o soluto nos estados fundamental, de transição ou excitados; a_i são os coeficientes de regressão que medem a sensibilidade da propriedade A às variações nos diferentes mecanismos de interacção; a_0 corresponde ao valor de A na fase gasosa ou num solvente inerte tomado como referência. Saliente-se que a introdução de um termo para cada mecanismo de interacção é puramente formal, visto que as interacções não ocorrem independentemente.

Dentro da perspectiva da análise do efeito do solvente por via multiparamétrica muitas equações foram sugeridas e testadas, combinando linearmente diferentes parâmetros empíricos [4, 5, 13]. É de salientar duas formulações importantes:

– a de Koppel e Palm [17]

$$\log k = \log k_0 + y^Y + p^P + eE + bB$$

que relaciona a constante de velocidade com interacções soluto-solvente não-específicas (Y – parâmetro de polariza-

ção expresso pela função de Kirkwood da constante dielétrica; P – parâmetro de polarizabilidade definido por $(\eta^2-1)/(2\eta^2+1)$ ou $(\eta^2-1)/(\eta^2+2)$) e específicas (parâmetros E e B que caracterizam o solvente, respectivamente, como electrofílico, doador protónico ou ácido de Lewis, e como nucleofílico, aceitador protónico ou base de Lewis).

– a de Kamlet e Taft [18, 19]

$$\log k = \log k_0 + s(\pi^* + d\delta) + a\alpha + b\beta + h\delta_H^2$$

onde π^* é um parâmetro de dipolaridade/polarizabilidade, δ é um termo de correcção à polarizabilidade, α e β são, respectivamente, medidas de acidez e da basicidade e δ_H é o parâmetro de solubilidade de Hildebrand que está associado à energia necessária para formar uma cavidade no solvente.

Aplicação

Com base nos valores das Tabelas 1 e 2, é possível testar diversas equações multiparamétricas, dependendo da combinação de $\log k$ com os diferentes parâmetros empíricos.

1 – Teste a hipótese de não colinearidade dos parâmetros escolhidos. Para tal verifique se existem correlações simples significativas entre eles.*

2 – Teste as equações possíveis de variação de $\log k$ com dois e três parâmetros do solvente. Determine os respectivos coeficientes de regressão, coeficientes de correlação e desvios padrão, utilizando análises de regressão linear múltipla.**

3 – Atendendo ao valor do desvio padrão, escolha a equação uniparamétrica e as multiparamétricas que melhor se ajustam aos resultados experimentais; represente graficamente os valores calculados de $\log k$ em função dos respectivos valores experimentais.***

4 – Interprete os resultados tendo em vista uma maior informação sobre o mecanismo das reacções de solvólise de $t\text{-BuCl}$, nomeadamente a natureza das interacções soluto-solvente e as características do complexo activado.

TABELA 3
Parâmetros da regressão linear simples e múltipla

$$\log k = a_0 + a_1 \frac{\epsilon-1}{2\epsilon+1} + a_2 \frac{\eta^2-1}{\eta^2+2} + a_3 E_T^N$$

EQUAÇÃO	a_0	a_1	a_2	a_3	r	σ
A	-72,244	140,68	–	–	0,857	1,142
B	14,910	–	-94,559	–	0,737	1,500
C	-15,347	–	–	13,252	0,974	0,502
D	-132,34	232,25	76,203	–	0,880	1,133
E	-54,054	97,214	–	3,3551	0,879	1,140
F	-23,551	–	28,663	15,769	0,990	0,452
G	-35,703	22,229	38,789	14,973	0,995	0,488

* Os alunos devem obter os resultados que se apresentam na Tabela 4.

** Os alunos devem obter os resultados que se apresentam na Tabela 3, equações D a G.

*** Os alunos devem obter gráficos análogos às Figuras 1, 2 e 3.

* Os alunos devem obter os resultados que se apresentam na Tabela 3, equações A a C.

TABELA 4
Correlações entre parâmetros do solvente
 $Y = a_0 + a_1 x$

Y	x	a_0	a_1	r	σ
f(ε)	g(η)	0,63401	-0,73526	0,940	$4,615 \times 10^{-3}$
f(ε)	E_T^N	0,41632	0,075797	0,914	$5,483 \times 10^{-3}$
g(η)	E_T^N	0,28621	-0,087810	0,862	$9,638 \times 10^{-3}$

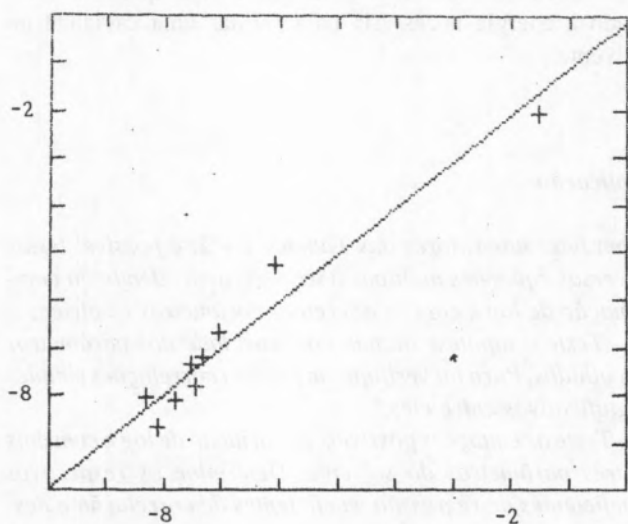


FIGURA 1
 $\log k_{cal}$ vs. $\log k_{obs}$ (equação C - Tabela 3)

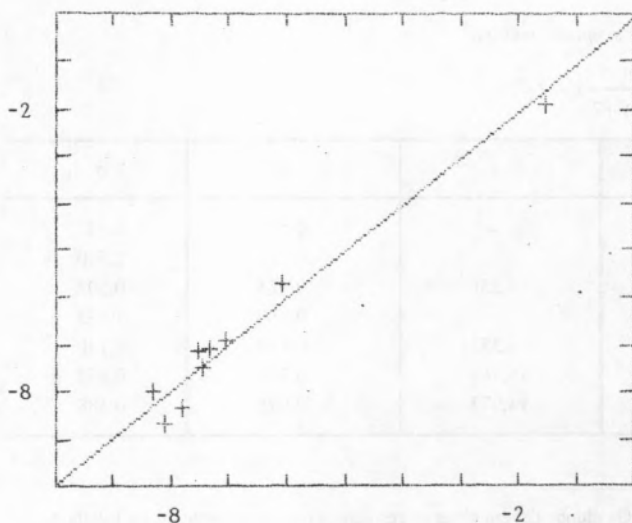


FIGURA 2
 $\log k_{cal}$ vs. $\log k_{obs}$ (equação F - Tabela 3)

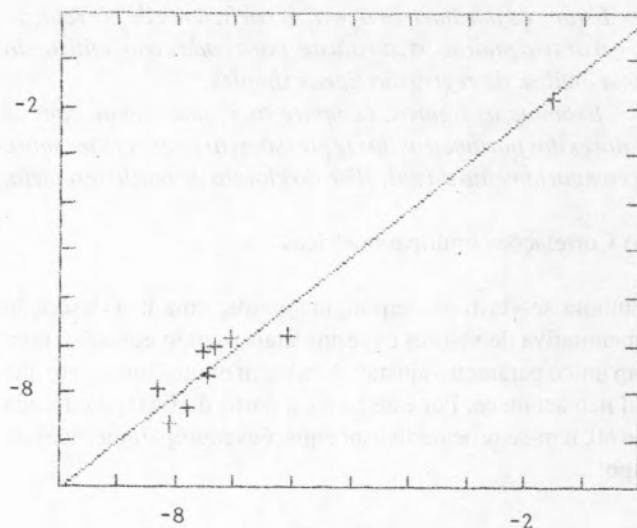


FIGURA 3
 $\log k_{cal}$ vs. $\log k_{obs}$ (equação G - Tabela 3)

Os comentários

Da observação da Tabela 4 pode concluir-se que há uma correlação linear significativa entre os parâmetros f(ε) e g(η), sendo apenas moderada nos restantes casos.

Quanto à escolha do modelo que melhor se ajusta ao conjunto de dados experimentais, ela deve basear-se numa metodologia estatística cujos parâmetros sejam relevantes. Assim, numa análise das correlações (Tabela 3), perante o valor dos coeficientes de correlação e dos correspondentes desvios padrão, considera-se que o segundo é de maior validade como critério de ajuste uma vez que o seu valor depende directamente do número de graus de liberdade do sistema, contrariamente ao do primeiro. A aplicação desta metodologia às equações da Tabela 3 leva à escolha das correlações estatisticamente preferenciais:

$$\log k = 15,347 + 13,252 E_T^N$$

$$\log k = 23,551 + 28,663 g(\eta) + 15,769 E_T^N$$

$$\log k = -35,703 + 22,229 f(\epsilon) + 38,789 g(\eta) + 14,973 E_T^N$$

Dos resultados analíticos (Tabela 3) e da observação dos gráficos (Figuras 1, 2 e 3), para a solvólise do cloreto de butilo terciário nos solventes estudados, pode concluir-se que

- um tratamento puramente electrostático, f(ε) ou g(η), é inadequado;

- as interações soluto-solvente dominantes são:

- as não-específicas devidas à polarizabilidade do solvente, representadas pelo termo g(η);
 - as específicas devidas à doação de ligações de hidrogénio pelo solvente, representadas pelo termo E_T^N ;
- os valores positivos dos coeficientes de regressão dos parâmetros f(ε), g(η) e E_T^N nas equações de melhor ajuste,

equações C, F e G, podem estar associados com o facto de, relativamente ao estado inicial, o estado de transição $[t\text{-BuCl}]^\ddagger$ ser mais polar, ter maior polarizabilidade e ser estabilizado por solvatação electrofílica [17].

Finalmente, pode dizer-se que as Análises de Correlação, embora com limitações, são de grande interesse, não só porque se consegue uma maior caracterização dos sistemas reaccionais mas também pelas suas capacidades interpretativas e preditivas.

Referências

- [1] F.E.L. Martins, R.M.C. Gonçalves, Boletim SPQ, 1988, **34**, 31.
 [2] A.M.N. Simões, A.R.T. Calado, L.M.P.C. Albuquerque e R.M.C. Gonçalves, Boletim SPQ, 1989, **35**, 25.
 [3] N.A. Menshutkin, Zeit. Phys. Chem., 1887, **1**, 611.
 [4] J. Shorter, «Correlation Analysis of Organic Reactivity - with particular reference to multiple regression», John Wiley, New York, 1982.
 [5] C. Reichardt, «Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, VCH, Weinheim, 1988.

- [6] L.P. Hammett, Physical Organic Chemistry», McGraw-Hill, New York, 2.^a ed. 1970.
 [7] E.S. Amis e J.F. Hinton, «Solvent Effects on Chemical Phenomena», Academic Press, New York, 1973.
 [8] E. Grunwald e S. Winstein, J. Amer. Chem. Soc., 1948, **70**, 846.
 [9] K.H. Meyer, Chem. Ber., 1914, **47**, 826.
 [10] E.M. Kosower, J. Amer. Chem. Soc., 1958, **80**, 3253, 3261, 3267.
 [11] K. Dimroth, C. Reichardt, T. Siepmann e F. Bohlmann, Liebigs Ann. Chem., 1963, **661**, 1.
 [12] «Handbook of Chemistry and Physics», 59 ed. CRC, Ohio, 1978/79.
 [13] L. Albuquerque e R. Gonçalves, «Cinética Química», Escolar Editora, Lisboa, 1986.
 [14] E.S. Swinbourne, «Analysis of Kinetic Data», Appleton Century Crofts, New York, 1971.
 [15] P.R. Bevington, «Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences», McGraw-Hill, New York, 1966.
 [16] R.M.C. Gonçalves, A.M.N. Simões e L.M.P.C. Albuquerque (para publicação).
 [17] I.A. Koppel e V.A. Palm em «Advances in Linear Free Energy Relationships», N.B. Chapman e J. Shorter, Plenum Press, New York, 1972, Cap. 5.
 [18] M.J. Kamlet, J.L. Abboud e R.W. Taft, J. Amer. Chem. Soc., 1977, **99**, 6027, 8325.
 [19] M.H. Abraham, R.M. Doherty, M.J. Kamlet, J.M. Harris e R.W. Taft, J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 1987, 913.

*A SPQ é sua amiga
 Você é amigo dos seus amigos
 Os seus amigos são amigos da SPQ?*



BOLETIM DE INSCRIÇÃO SPQ

Nome _____

Morada _____

Telefone _____

Delegação a que deseja pertencer: Coimbra Lisboa Porto

Endereço Profissional _____

Habilitações Académicas _____

Cargo que desempenha _____

Junto envio o cheque nº _____ Banco _____

referente à minha quota da SPQ no ano de 1990.

_____, ____ de _____ de 1990

Assinatura _____

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**Mestrado em Ensino da
Física e da Química**

1990 / 91

OBJECTIVOS

O Mestrado em Ensino da Física e da Química tem como objectivos fundamentais proporcionar formação complementar nas áreas de Física e de Química quer a nível científico quer sob o ponto de vista educacional, assim como na área das Ciências da Educação.

CONDIÇÕES DE ADMISSÃO

- Licenciatura em Física, Química, Físico-Químicas, ou nas seguintes áreas afins: Eng. Física, Química Industrial, Bioquímica, Eng. Química, Eng. de Materiais, Eng. Electrónica, Eng. Informática ou «currículo equivalente».
- Frequência do Curso de Pós-Graduação com a duração de 10 semanas definido neste folheto.
- Poderá ser necessário o pagamento de propinas.

ORGANIZAÇÃO DO CURSO

O aluno frequentará no 1.º ano o conjunto de disciplinas do curso num total de 16 unidades de crédito. No 2.º ano será elaborada uma tese sob a orientação de um supervisor de Física ou de Química.

**I – Elenco das disciplinas
(com as respectiva unidade de crédito)**

Tópicos Complementares de Física Moderna – (1,5)
Tópicos Complementares de Física Clássica – (2)
Materiais Orgânicos e Inorgânicos – (0,9)
Sistemas Bioquímicos – (0,9)
Reactividade Química – (0,7)
Estrutura e Dinâmica Molecular por Espectroscopia – (0,7)
Computadores no Ensino – (0,3)
Tecnologias Educativas – (1)
História das Ideias em Física – (1)
Didáctica da Física – (1,5)
Laboratórios de Física – (0,5)
A Química numa Perspectiva Histórica – (0,4)
Didáctica da Química – (2,3)
Laboratórios de Química – (0,3)
Metodologia de Investigação Educativa – (1)
Educação e Desenvolvimento – (1)

**II – Disciplinas do Curso de Pós-Graduação
(e respectiva escolaridade)**

Mecânica – (8 horas)
Mecânica dos Flúidos – (4 horas)
Electromagnetismo – (8 horas)
Fenómenos Ondulatórios – (6 horas)
Física Térmica e Teoria Cinética – (6 horas)
Tópicos de Física Moderna – (8 horas)
Tópicos de Energética Química – (10 horas)
Tópicos de Electroquímica – (7 horas)
Tópicos de Análise Química – (7 horas)
Tópicos de Química Orgânica – (8 horas)
Tópicos de Estrutura Atómica e Molecular – (8 horas)

INFORMAÇÕES

O Curso de Pós-Graduação terá início em Outubro de 1990, e o Mestrado em Janeiro de 1991. Dentro do possível as aulas decorrerão nas tardes de 6.ª-feira e manhãs de sábado.

Prazo de candidaturas: 2 a 16 de Julho

Prazo de inscrições: 3 a 15 de Setembro

Numerus clausus: 20

O Curso de Pós-Graduação pode ser frequentado como unidade autónoma, independente do Mestrado.

ENVIAR A CORRESPONDÊNCIA PARA:

**Curso de Mestrado em Ensino da Física
e da Química
Departamento de Física
Universidade de Coimbra
3000 COIMBRA**

Telefs.: (0)39 - 2 36 71 / 2 36 75 / 2 92 52

Telex: 5 26 01 DEFIUC P

Telefax: (0)39 - 2 91 58

Divulgação Científica em Portugal

– uma resenha bibliográfica

Carlos Fiolhais ^a

Têm sido numerosos os livros de divulgação científica que têm sido publicados entre nós nos últimos anos. De entre esses livros assumem particular destaque os que abordam os grandes temas da física e da química deste século.

Em 1987, o autor publicou na "Gazeta da Física", vol. 10, ps. 65 e 146, uma lista comentada de livros de divulgação das modernas ciências físicas e químicas. Actualiza-se agora essa lista, acrescentando-se às 29 obras então recenseadas outras 64. Incluem-se livros publicados desde 1987 até Maio de 1990, com uma ou outra excepção que escapou na lista anterior. Pretende-se assim ajudar professores e estudantes de física e química na escolha de livros de divulgação científica.

Segue-se a mesma classificação temática que no artigo anterior, embora o critério de inclusão no último tema ("Fenómenos irreversíveis") seja um pouco mais generoso de modo a incluir alguns livros de biologia que têm a ver com a termodinâmica dos sistemas abertos.

Apresentam-se no fim algumas sugestões para tradução, que se espera sejam úteis aos editores.

Agradecem-se aos leitores desta "lista" quaisquer correcções ou manifestações de opinião.

1. Física Relativista

• F. Balibar, "Einstein: Uma leitura de Galileu e Newton. Espaço e relatividade", Edições 70, Col. O Saber da Filosofia, Lisboa, 1988 (tradução de A. Castanho do original francês "Galilée, Newton, lus par Einstein", PUF, 1984), 127 pp.

Um roteiro interessante dos caminhos que conduziram à teoria da relatividade. O livro centra-se no entanto na relatividade clássica. São muito úteis do ponto de vista pedagógico as traduções de Galileu que se encontram no livro. Nota: em relação ao original inverteu-se o lugar do nome de Einstein, num golpe publicitário que pode iludir os leitores.

• A. Einstein, "Reflexões, encontros e diálogos", Universidade Nova de Lisboa, Lisboa, introdução, selecção e tradução de A. M. Nunes dos Santos, 1988, 83 pp.

Trata-se do primeiro de um conjunto de quatro livrinhos da responsabilidade de António Nunes dos Santos, da Universidade Nova de Lisboa. São edições cuidadas, com bonitas capas, traduções criteriosas e anotações oportunas. Todos juntos dariam um belo volume mas assim, dispersos, fica um

conjunto de simpáticos livrinhos. Este primeiro livrinho inclui textos dispersos de Einstein, textos sobre Einstein de de Broglie, Oppenheimer e Heisenberg e uma interessantíssima entrevista a Einstein feita pelo historiador de ciência I. B. Cohen e publicada em 1955 no "Scientific American".

• A. Einstein, "Reflexões e testemunhos científicos", Universidade Nova de Lisboa, Lisboa, introdução, selecção e edição de A. M. Nunes dos Santos, 1989, 74 pp.

Inclui textos de Einstein, textos sobre Einstein de de Broglie e Born e uma bibliografia dos anos de ouro do grande físico alemão.

• "Homenagem a Albert Einstein, Testemunhos e Controvérsia", Universidade Nova de Lisboa, Lisboa, apresentação e coordenação de A. M. Nunes dos Santos e M. A. Bento, 1989, 96 pp.

Inclui textos sobre Einstein de Sommerfeld e Bohr (este muito importante, uma vez que a maior polémica científica do século XX foi precisamente entre Einstein e Bohr, a propósito do significado e alcance da mecânica quântica) e uma bibliografia compreendendo os trabalhos de Einstein desde a relatividade geral até à sua morte.

• A. Einstein, "Física e realidade", Universidade Nova de Lisboa, Lisboa, introdução e nota biográfica de A. M. Nunes dos Santos, 1990, 66 pp.

Um texto de Einstein sobre o método científico, a relatividade e a teoria quântica.

• A. Brotas, "O essencial sobre a teoria da relatividade", Imprensa Nacional, Lisboa, 1988, 61 pp.

Num estilo muito próprio, António Brotas, professor do Instituto Superior Técnico, transmite num espaço muito curto "o essencial" das ideias da relatividade. O leitor deve comprar sem falta porque é barato, cabe no bolso e é útil. V. a recensão que foi publicada na revista CTS, nº 6, Set./Dez 1988, p. 55 e na "Gazeta de Física" 11 (1986) 160.

• C. Mill, "Einstein tinha razão? Testando a teoria da relatividade geral", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de J. C. Fernandes do original inglês "Was Einstein right?", 1986, revisão e notas de D. Lopes Gagean), 306 pp.

^a Departamento de Física da Universidade de Coimbra
3000 Coimbra

A resposta ao título é "Sim. Tinha". Hoje, setenta anos depois de introduzida a relatividade geral, todo um conjunto de avanços tecnológicos permite confirmar essa teoria. Não se conhece um único desvio, embora se esteja ainda à espera da confirmação absoluta de fenómenos como os buracos negros ou as ondas gravitacionais. O autor, físico experimental especialista em relatividade, fornece-nos numerosos exemplos de concordância entre teoria e experiência, num livro que tem de ser recomendado (desiludam-se, no entanto, os que vão à procura dos factos mais conhecidos da relatividade restrita, como o $E=mc^2$). Nota: o subtítulo "Testando..." parece brasileiro!

2. Física Quântica

• J. Andrade e Silva e G. Lochak, "Quanta, grãos e campos", Col. Estudo Geral, Instituto de Novas Profissões, Col. "Estudo Geral", Lisboa, 1988 (tradução de M. Pina do original francês "Quanta, grains et champs", 1969, 175 pp.

J. Andrade e Silva, professor da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, é um dos maiores especialistas portugueses na história das ideias científicas. Foi discípulo de Louis de Broglie e desse contacto veio-lhe naturalmente alguma aversão às interpretações correntes da mecânica quântica. Este livro, traduzido do francês (o que é raro: um livro de um cientista português, publicado primeiro em França!), está bem escrito e tem boas ilustrações.

• C. Bernardini, "O que é uma lei física?", Editorial Notícias, colecção Biblioteca de Conhecimentos Básicos, Lisboa, 1988 (tradução de Franco de Sousa do original italiano "Che cos'è una legge fisica", Riuniti), 157 pp.

Este livro é interessante e recomenda-se, até porque tem algum humor aqui e ali e trata vários domínios da física. Por um daqueles acasos inexplicáveis, surgiu no mercado praticamente ao mesmo tempo que o livro de Feynman que em português tem o mesmo título. Os dois livros têm até algumas semelhanças (o livro de Feynman é anterior). Inclui-se aqui o livro, apesar de dar mais espaço à mecânica clássica, aborda alguns assuntos de mecânica quântica e tinha, de resto, que se incluir nalgum lado. Os "cartoons" são curiosos.

• D. Bohm e F. David Peat, "Ciência, ordem e criatividade", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de J. Branco do original norte-americano, "Science, order, creativity", Bantam Books, 1987), 366 pp.

David Bohm é um conhecido adversário da "escola de Copenhaga" da mecânica quântica, apesar de ter escrito um livro que constitui uma referência nesse domínio da física. Depois disso tem-se dedicado à divulgação das "ideias holísticas", sendo a sua obra mais conhecida "Wholeness and the implicate order", Routledge & Kegan Paul, 1980. F. D. Peat é co-autor com J. Briggs de um livro também de inspiração holística intitulado "Looking Glass Universe. The emerging science of wholeness" (Simon & Schuster, 1984). O livro de Bohm e Peat é um libelo contra aquilo que os autores chamam falta de criatividade da ciência contemporânea, sendo a mecânica quântica discutida entre outros assuntos. É controverso que a ciência moderna

seja pouco criativa. É evidente que não basta uma conversa entre um cientista e um jornalista para que resulte algo de muito criativo... Até porque não se pode ser criativo quando se quer mas sim quando se tem a inspiração para tanto.

• F. Capra, "O Tao da Física", Editorial Presença, Lisboa, 1989 (tradução do original inglês "The Tao of physics", Wildwood House, 1975, republicada pela Fontana/Collins). Este livro não é recomendado. Trata-se de uma boa mistura de física com filosofia oriental. O autor vê analogias por todo o lado, sem apresentar fundamentos suficientes. Uma das páginas em sânscrito aparece ao lado de uma outra com equações de física: não se prova nada com isso (para muita e boa gente as duas páginas são chines...). Esta mistura de ciência e misticismo esteve e ainda está em moda. Depois do enorme êxito deste livro (há um outro livro do mesmo género sobre física quântica e filosofia oriental, de G. Zusak, intitulado "The Dancing Wu Li Masters", Hutchinson, 1979, felizmente ainda não traduzido em português), Capra publicou em 1982 "The turning point", uma obra que apesar de controversa é um pouco mais séria. Aborda o futuro da sociedade mundial e alcançou êxito em muitos países (existe uma tradução brasileira "O ponto de mutação", Cultrix, S. Paulo, s.d.).

• P. Davies, "Outros mundos", Edições 70, Col. Universo da Ciência, Lisboa, 1987 (tradução de V. Ribeiro do original inglês "Other worlds", Dent and Son, Londres), 197 pp. Depois de "Deus e a Nova Física", que abriu a colecção "Universo da Ciência", o físico inglês Paul Davies volta à carga. Nada de especialmente interessante, andando à volta das tradicionais especulações sobre a mecânica quântica.

• P. Davies, "Superforça. Em busca de uma teoria unificada da natureza", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1988 (tradução e notas de P. I. Teixeira do original inglês "Superforce", Glenister Gavin, 1984), 359 pp.

Livro banal, que corre o risco de se desactualizar aqui e ali. Aborda a mecânica quântica, a física das altas energias e a cosmologia. Já faz referência à teoria das supercordas, que são o último grito da superforça.

• R. Feynman, "QED. A estranha teoria da luz e da matéria", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1988 (tradução de A. Ovídio Baptista, revista por António M. Baptista, do original norte-americano "QED. The strange theory of light and matter", 1985, prólogo de L. Mautner, prefácio de R. Leighton), 180 pp.

Um livro de Feynman e está tudo dito: trata-se de uma das suas últimas obras antes da sua morte em 1988. O grande físico norte-americano, Prémio Nobel, cuja "auto-biografia" está publicada em dois interessantes volumes da Gradiva ("Está a brincar, Sr. Feynman!" e "Nem tanto a brincar, Sr. Feynman!") tenta trocar por miúdos um dos ramos da física pelo qual o autor mais se interessou: a electrodinâmica quântica, a mais exacta das teorias físicas. Fornece muitos exemplos para tornar a teoria da luz acessível. Nem sempre o consegue, mas a culpa pode não ser dele porque a luz é, de facto, uma coisa estranhíssima.

• R. Feynman, "Está a brincar, Sr. Feynman! Retrato de um físico enquanto homem", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1988 (tradução de I. Neves do original norte-americano "Surely you're joking, Mr. Feynman!", W. Norton, 1985, nota de introdução de O. T. Almeida, prefácio de R. Leighton e introdução de A. Hibbs), 325 pp.

Relato divertidíssimo de episódios da vida de Feynman. Embora não seja um livro de divulgação científica propriamente dito serve para desmitificar os cientistas. Ver crítica de E. Lage na Gazeta da Física 11 (1988) 71.

• R. Feynman, "Nem sempre a brincar, Sr. Feynman! Novos elementos para o retrato de um físico enquanto homem", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de M. G. Segurado, com revisão científica de J. Branco, do original norte-americano "What do you care what other people think?", W. Norton, 1988), 261 pp.

Continuação do livro anterior. Menos humor e até alguma amargura (daí ser feliz o título escolhido para a edição portuguesa). A segunda parte conta a experiência de Feynman na Comissão para averiguar o desastre do Challenger. Quando a técnica falha, chamam-se os físicos para ver o que é que falhou...

• R. Feynman, "O que é uma lei física", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução e introdução de C. Fiolhais do original norte-americano "The character of the physical law", MIT Press, 1963), 222 pp.

Livro clássico cuja tradução a Portugal chega tarde. Mas mais vale tarde do que nunca. Trata-se de uma sequência de conferências sobre vários domínios da física, proferidas na Universidade de Cornell em 1963 e gravadas pela BBC, que revelam bem o estilo vivo e fresco de Feynman. Recomenda-se a todos os professores pela originalidade da exposição. O capítulo sobre a mecânica quântica, por exemplo, é genial e tem sido referido inúmeras vezes. Na segunda edição foram corrigidas algumas gralhas.

• J. Gribbin, "A procura da dupla hélice – A física quântica e a vida", Editorial Presença, Lisboa, 1989.

Não gosto de Gribbin. Não li nem tenciono ler.

• M. Kaku e J. Trainer, "Para além de Einstein – A investigação cósmica para uma teoria do universo", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1989 (tradução de G. Correia da Silva do original norte-americano "Beyond Einstein: The cosmic quest for the theory of the universe"), 172 pp.

Este livro é um exemplo de uma coisa que nem sempre funciona bem que é a interacção entre um físico e um jornalista. A tradução não é grande coisa (aparece "supercaideias" em vez de "supercordas", "matéria obscura" em vez de "matéria escura", etc.).

• B. Parker, "O sonho de Einstein", Edições 70, Col. Universo da Ciência, Lisboa, 1988 (tradução de C. Pina e Brito do original inglês "Einstein's dreams", 1986), 241 pp.

O "sonho de Einstein" era a unificação das forças. A esse problema e não à relatividade dedicou a maior parte da sua vida. O livro, que fala de relatividade, cosmologia e teoria quântica unificada, não tem nada de especial. Repare-se na

quantidade de títulos que envolvem o nome de Einstein e anote-se este apenas como mais um.

• J. C. Polkinghorn, "O mundo dos quanta", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1988 (tradução de "The quantum world", Longmans, 1984, republicado pela Penguin).

O inglês Polkinghorn tem a particularidade curiosa de, além de físico teórico, ser pastor protestante. Este "pastor" tem jeito para a divulgação e, se divulgar a palavra de Deus como divulga a ciência, as suas prédicas devem ser bem concorridas. É semelhante mas melhor (até porque é mais curto) do que "Outros mundos" de P. Davies. Existe outro livro, em inglês, do mesmo autor: "The particle play", Freeman, 1979.

• K. Popper, "A teoria dos quanta e os cisma da física", Vol. III do Pós-Escrito à Lógica da Descoberta Científica, organização de W. Bartley III, Publicações Dom Quixote, Lisboa, 1989 (tradução de N. F. Fonseca do original inglês "Quantum Theory and the Schism of Science", Hutchinson, 1956), 227 pp.

Boa edição esta dos três volumes do "Pós-Escrito à Lógica da Descoberta Científica", apesar de não existir ainda na edição nacional "A Lógica da Descoberta Científica". Popper é um realista, na linha einsteiniana, e portanto um adversário de algumas das ideias da mecânica quântica, tal como elas são professadas pela "escola de Copenhaga". A crítica de Popper, ao contrário de outras, é interessante e merece uma leitura atenta.

• B. Toben e F. A. Wolf, "Espaço-Tempo ou mais além – Para uma explicação do inexplicável", 1986, Via Óptima, Lisboa (tradução não assinada de "Space Time and Beyond", 1975), 196 pp.

Livro delirante, que se recomenda a quem estiver interessado em se rir um bom bocado mas que não se recomenda a quem não esteja para isso. Tiram-se as conclusões mais disparatadas da física moderna. Só deve portanto ser lido por pessoas de sólida formação científica. Ao incauto, que leia aquela sucessão de bonecos com frases cada vez mais loucas e que no fim veja um suposto físico (F. Wolf, autor também de "Taking the quantum leap", Harper & Row, 1981) a fundamentar aquilo tudo, desde a levitação até à reencarnação, e a extensa bibliografia com muitas obras sérias, até pode acontecer que, a partir daí, passe a acreditar em tudo... A editora é desconhecida e deixa o nome do tradutor também no desconhecimento. O livro faz parte de uma série, que com uma ou outra excepção, é também delirante.

3. Física Nuclear e de Partículas

• F. Close, "A Cebola Cósmica – Os quarks e a natureza do universo", Edições 70, Col. Universo da Ciência, Lisboa, 1987 (tradução de P. Vitória do original inglês "The Cosmic Onion", Heinemann, 1983), 193 pp.

Livro muito interessante cujo título dá conta das várias escalas do universo físico. Várias "caixas" ajudam à organização do volume e as partículas são explicadas com o auxílio de alguns bonecos. O autor é um prestigiado físico de partículas inglês.

• H. Fritsch, "Quarks – A matéria-prima deste mundo", 1990, Editorial Presença, Lisboa, 1990 (prefácio de H. Schopper, tradução de M. Regina Briz, revista por P. Picciochi, do original alemão "Quarks. Urstoff unserer Welt", Piper, 1981), 229 pp.

O autor é físico de partículas alemão, da Universidade de Munique, que tem revelado alguma habilidade para a transmissão da ciência ao público (v. artigo da "Bild der Wissenschaft", cuja tradução em português foi publicada na revista "Omnia", nº 10, Jul./Ago. 1989, p. 76). São tão poucas as obras de autores alemães oferecidas ao público português de divulgação científica que esta, apesar de atrasada e de a tradução pecar amiúde do ponto de vista técnico, é bem-vinda. A exposição é medianamente clara. O mesmo autor tem um outro livro sobre a origem do universo, publicado pela editora Piper de Munique.

4. Astrofísica e Cosmologia

• C. Allègre, "Da pedra à estrela", Col. "Ciência Nova", Publicações D. Quixote, Lisboa, 1988.

O autor é geólogo (em português tem ainda publicado pela Gradiva "A Espuma da Terra"). A obra, com bastantes ilustrações, percorre o caminho que vai das ciências geológicas à astrofísica. O conhecimento dos planetas do sistema solar tem aumentado nos últimos tempos com o envio de sondas e o intervalo entre as Ciências da Terra e as Ciências do Espaço está-se a tornar cada vez menor.

• I. Asimov, "Tão longe quanto alcança o olhar humano", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1989.

I. Asimov, escritor norte-americano de origem russa e formação em bioquímica, é de longe o mais prolixo autor de livros de divulgação científica e de ficção científica: tem mais de duzentos livros publicados! Dá a ideia que sabe de tudo porque escreve sobre tudo. Se calhar sabe mesmo de tudo mas, francamente, gosto mais dele como autor de ficção científica (de livros como, por exemplo, "A Nuvem Negra", publicado na colecção "Argonauta" pela Livros do Brasil).

• I. Asimov, "A Terra e o Cosmos – os horizontes do espaço, do tempo, da matéria e da energia", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1989.

Outro Asimov.

• I. Asimov, "O universo da ciência 1 – O que é a ciência. O universo, o sistema solar, a terra e a atmosfera", Presença, Lisboa, 1987 (tradução de "The new intelligent man's guide to science"), 327 pp.

Asimov escreve demais. Este volume e os seguintes são uma espécie de enciclopédia asimoviana da ciência. Incluem-se aqui, sob a designação de astrofísica, porque o primeiro volume começa por aí.

• I. Asimov, "O universo da ciência 2 – Os elementos – As partículas – As ondas – A máquina e o reactor", Presença, Lisboa, 1987, 325 pp.

• I. Asimov, "O universo da ciência 3", Presença, Lisboa, 1987.

• I. Asimov, "O universo da ciência 4", Presença, Lisboa, 1987.

• J. Barrow e J. Silk, "A mão esquerda da criação. Origem e evolução do universo em expansão", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de M. A. Gomes da Costa, revista por J. F. Gomes da Costa, do original norte-americano, "The left hand of creation", Basic Books, 1983), 271 pp.

Os dois autores são astrofísicos e fazem um relato do que se conhece do Big Bang e dos processos que se lhe sucederam. Actualiza-se assim o conteúdo de "Os três primeiros minutos" de Weinberg, publicado também pela Gradiva. Recomenda-se, portanto, até porque este livro não conheceu nem na crítica nem no público a ressonância que merecia. J. Barrow é também autor de dois volumes muito interessantes mas grandes, o primeiro de parceria com Tipler e o segundo a solo: "The anthropic cosmological principle" (Oxford University Press, 1986) e "The world within the world" (idem, 1989).

• R. Clarke, "Do universo ao homem", Edições 70, Col. Universo da Ciência, Lisboa, 1986.

Pequena obra de antropologia com uma pequena introdução sobre a história do universo e da Terra. Figura aqui apenas por causa dessa pequena introdução.

• J. Davies, "O impacto cósmico", Edições 70, Col. Universo da Ciência, Lisboa, 1989 (tradução de T. Pérez do original norte-americano "The cosmic impact", 1986), 187 pp.

Livro sobre um tema moderno que é o estudo dos impactos de meteoritos em planetas do sistema solar. O autor é astrónomo (não confundir com P. Davies, de "Deus e a Nova Física!"). É abordado nomeadamente o grande meteorito que, de acordo com os Alvarez, teria extinto os dinossauros. A nossa Terra é portanto objecto de destruições ocasionais, resultado do movimento desordenado de pequenos corpos no espaço. Esta visão contrasta com a do movimento ordenado que existe desde Kepler e Newton.

• J. Gribbin, "Génesis – A origem do homem e do universo", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1988 (tradução de R. Sousa Machado do original inglês "Genesis", 1981), 314 pp.

Livro mau, em que o nome do autor, pelo menos, na primeira edição aparece gralhado (surge Gribbrin quando na realidade é Gribbin). Um mau começo para a colecção "Forum da Ciência" das Publicações Europa América, que infelizmente se tem especializado em Gribbin. As gralhas no interior são também inúmeras. Só para dar 3 exemplos: Na p. 24, está "expanção" (sic) em vez de "expansão", na p. 47 está "eclipses" em vez de "elipses" (é bem diferente!), na p. 177, está "exploração" em vez de "explosão". E por aí fora (há alguns erros divertidos, como "anais" em vez de "canais". Nem vale a pena falar deste livro: não vale o preço de capa.

• J. Gribbin, "À procura do Big Bang", Editorial Presença, Lisboa, 1988.

Não li, porque são demasiados os livros de Gribbin.

• J. Gribbin, "Os buracos brancos – o princípio e o fim do espaço", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1988.

Também não li. Tanto Gribbin já chateia.

• S. Hawking, "Breve história do tempo. Do Big Bang aos Buracos Negros", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1988 (tradução de Ribeiro da Fonseca do original inglês "A Brief History of Time", 1988, revisão, adaptação do texto e notas de J. F. Gomes da Costa, prefácio de C. Sagan), 247 pp.

Um verdadeiro êxito de vendas, um pouco por todo o lado do mundo e também em Portugal. As pessoas compram mas não lêem (o leitor não compre se não vai ter tempo para ler). Este livro, bastante anunciado, prometia mais do que veio a revelar. Estou convencido de que o seu êxito resulta de uma gigantesca campanha de promoção que tem a ver com o facto de o autor se encontrar fisicamente inutilizado numa cadeira de rodas. O revisor português fez aquilo que não devia que era corrigir várias vezes o autor. A responsabilidade da edição é do editor, que deixou passar as anotações a esmo do revisor. V. crítica na revista "Omnia", nº 8, Mar./Abr. 1989, p. 68.

• H. Pagels, "Simetria perfeita", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1990 (tradução de H. Leitão e P. Ivo Teixeira do original norte-americano "Perfect Symmetry", Simon & Schuster, 1985, reeditado pela Bantam), 455 pp.

Um livro bom e bem traduzido sobre a história do universo e a história da descoberta dessa história. Pagels escreve bem, como já se sabia desde "O Código Cósmico". O seu falecimento em 1988 num acidente de montanhismo constituiu uma grande perda para a ciência e para a literatura da ciência. Deixou-nos ainda "The dreams of reason", Simon & Schuster, 1988, que vai ser publicado em português pela Gradiva, e que trata do impacte do computador na ciência. Mas antes que haja outro Pagels, o leitor pode e deve comprar este.

• D. Raup, "O caso Némesis. História da morte dos dinossauros e dos caminhos da ciência", Col. Forum da Ciência, Publicações Europa América, Mem Martins, 1989 (tradução de R. Sousa Machado, revista por Carvalho dos Santos, do original inglês, "The Nemesis affair"), 189 pp.

Livro na mesma linha de "O impacto cósmico", de J. Davies, mas melhor. Raup é um paleontólogo norte-americano que propôs uma teoria sobre a queda do meteorito que teria eventualmente extinto os dinossauros. Uma estrela companheira do Sol, ainda por descobrir, seria afinal a responsável... Raup consegue ser brilhante ao relatar por dentro os meandros da moderna investigação científica. A comunidade científica reage das mais variadas maneiras quando se propõe alguma tese um pouco mais ousada (como aconteceu com a experiência portuguesa descrita por Sebastião Formosinho, professor da Universidade de Coimbra, em "Os bastidores da ciência", publicado pela Gradiva em 1988). Este é o melhor volume da colecção "Forum

da Ciência" da Europa América.

• S. Rose e L. Appignanesi e outros, "Para uma nova ciência", Gradiva, Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de A. Pires Dias, A. Oliveira, J. Fernandes e L. Carvalho Rodrigues do original inglês "Science and beyond", 1986), 256 pp.

Colecção desinteressante, que destoa na colecção Ciência Aberta. É a única colecção de textos avulsos nessa colecção. Os textos são sobre os mais variados temas (até sobre o feminismo!) e têm uma qualidade muito desigual. Desaconselha-se, portanto. No final, aparece um texto do astrofísico inglês J. Taylor sobre os buracos negros e é isso que o livro é aqui recenseado (lembre-se que ele tem um livro traduzido em português sobre esse assunto, "Os buracos negros", Europa América, 1983).

• C. Sagan, "As ligações cósmicas. Uma perspectiva extraterrestre", produção de J. Agel, Bertrand, Venda Nova, 1987, tradução de M. Teresa Lago do original norte-americano "The cosmic connection", 1973), 264 pp.

Sagan é um dos mais ardentes defensores dos programas para procura de inteligência extraterrestre, do qual o mais importante é o projecto SETI ("Search for Extraterrestrial Intelligence"). Apesar de ser um Sagan e de ser publicado por uma editora tão conhecida como a Bertrand, este livro foi pouco referenciado. A tradutora, Teresa Lago, é uma das principais impulsionadoras da astronomia em Portugal, sendo responsável por um Instituto de Astrofísica ligado à Universidade do Porto.

• S. Weinberg, "Os três primeiros minutos", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1987 (tradução do original norte-americano "The first three minutes", A. Deutch, 1977, republicado depois pela Bantam, entre outras).

Um clássico da astrofísica. Um Prémio Nobel da Física escreveu numa altura crucial um livro sobre a origem do universo, que foi "devorado" não só pelos leigos como pelos próprios cientistas. Com este livro dá-se notícia da união de dois mundos até então separados: o muito pequeno e o muito grande. S. Weinberg, físico do muito pequeno, explica aqui de forma sucinta mas brilhante como é que as partículas se relacionam com a origem do universo. V. crítica de E. Lage publicada na Gazeta de Física 11 (1988) 71.

5. Fenómenos irreversíveis (incluindo termodinâmica, biologia, etc)

• M. Barbieri, "Teoria Semântica da evolução", Fragmentos, Col. Biblioteca Científica, Lisboa, 1987, prefácio de R. Thom (tradução de M. L. Pinheiro do original italiano "La teoria semantica dell'evoluzione", Boringhieri), 187 pp. Barbieri procura uma nova interpretação da evolução (a tese é que "a cooperação é mais importante do que a selecção"). Não tenho a certeza se o consegue, i.e. se a interpretação é nova ou se se trata apenas de um rephraseamento e da junção da obra de vários autores. São referidas, por exemplo, as ideias de M. Eigen sobre a origem da vida.

• A. Cairns Smith, "Sete pistas para a origem da vida. Uma

história científica contada à maneira de um romance policial", Editorial Presença, Lisboa, 1986 (tradução de J. J. Sousa Ramos e A. Telma dos Reis e Sousa do original inglês, "Seven clues to the origin of life", Cambridge University Press, 1985), 128 pp.

A teoria é exótica. A forma e o estilo do livro são originais. O livro é pequeno. Se outras razões não existissem, estas seriam suficientes para o recomendar.

- F. Crick, "Vida. O mistério da sua origem e natureza", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1988 (tradução e revisão de M. C. Duque Magalhães do original inglês "Life itself", Simon & Schuster, 1981), 193 pp.

Outra teoria exótica, a da "panspermia" (a vida teria vindo do espaço) da autoria de um Prémio Nobel da Química, co-autor do código genético. Alguns cientistas quando ficam velhos têm coisas dessas (recorde-se aqui B. Josephson, Prémio Nobel da Física, que se tem ocupado da parapsicologia). No entanto, a "Vida", descontados os perigos da especulação, é até um livro interessante e motivador, que em Portugal apesar disso não teve grande eco.

- R. Dawkins, "O relojoeiro cego", Edições 70, Col. Universo da Ciência, Lisboa, 1988 (tradução do original inglês "The blind watchmaker", Longmans, 1986, republicado pela Penguin).

Um livro muito bom, o melhor da coleção "Universo da Ciência" das Edições 70. Não sei porque é que este livro passou despercebido entre nós. O problema deve ser que as ideias de Darwin são ignoradas no nosso país. Dawkins defende inteligentemente o ponto de vista de que a evolução é cega e portanto não é necessário invocar um "criador". São bastante curiosas as experiências computacionais para obter formas de vida (esse software para MacIntosh é comercializado por uma casa inglesa).

- R. Dawkins, "O gene egoísta", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de A. Paula Oliveira do original inglês "The Selfish gene", Oxford University Press, 1976), 317 pp.

Livro um pouco datado, mas que marcou uma época. O etologista português Bracinha Vieira no prefácio coloca as devidas reservas ao conteúdo e está no seu direito. No entanto, Dawkins escreve muito bem, muito melhor que a média dos autores de divulgação. O seu último livro "The extended phenotype", Oxford University Press, 1989, também deveria ser traduzido para portugueses.

- M. Eigen e R. Winkler, "O Jogo", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (prefácio e tradução de C. Fiolhais do original alemão "Das Spiel. Naturgesetze steuern den Zufall", Piper, 1975), 455 pp.

Para quem gosta de jogos, esta obra da autoria de um Prémio Nobel da Química e de uma sua colaboradora, apesar de não ser fácil, oferece um sem número de perspectivas. Receio bem, no entanto, que o leitor compre e acabe por abandonar na estante por achar difícil de seguir. Quando tiver tempo, pode sempre voltar à estante... Ver a crítica no "Expresso-Revista" de 14/10/1989, p. 90.

- J. Gleick, "Caos", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa,

1989 (tradução de J. C. Fernandes e L. Carvalho Rodrigues do original norte-americano "Chaos. Making a new science", Viking Penguin, 1987, prefácio e revisão científica de Jorge Buescu), 420 pp.

Livro excelente. Trata-se de uma obra prima de reportagem da moderna ciência do "caos" realizada por um jornalista científico junto de muitos cientistas (físicos, matemáticos, biólogos, etc.). Indispensável para os jovens que gostam de programar e de usar o computador para criar fractais e atratores estranhos. As figuras têm excelente qualidade e um forte poder de atracção, incluindo a gravura da capa, do alemão Peitgen (a capa é de Peitgen e não de A. Lopes como vem escrito na ficha técnica). Falta o índice de assuntos que vem no original. Ver recensão no "Expresso-Revista" de 17/3/90, p. 57.

- S. R. Gould, "O mundo depois de Darwin. Reflexões sobre história natural", Editora Presença, Col. Limiar do Futuro, 1988 (tradução, revista por P. Pichiochi, de P. Vitória do original norte-americano "Ever since Darwin – reflections on natural history", 1977), 244 pp.

S. R. Gould não precisa de elogios. É um paleontólogo da Universidade de Harvard que tem o dom da comunicação. Tudo o que vem dele é bom, incluindo este conjunto de textos sobre a evolução. Sairá na Gradiva o último livro dele "Wonderful Life", Norton, 1989, onde sublinha o papel do acaso no processo da evolução biológica.

- S. J. Gould, "Quando as galinhas tiverem dentes", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1989 (tradução de J. Palmeiro e J. Minhoto Marques, revista por de C. Marques da Silva, do original norte-americano "Hen's teeth and horse's toes", 1983), 503 pp.

Um bom livro, como todos os de Gould. É uma grande colectânea de textos publicados em vários locais que aparecem, com uma certa unidade, sob um título original. São muito interessantes os capítulos sobre a queda dos meteoritos e as extinções em massa. Dá a ideia que Gould tem uma erudição incomensurável na biologia, como Borges na literatura.

- J. Gribbin, "A trama do tempo", Publicações Europa América, Col. Forum da Ciência, Mem Martins, 1988 (tradução de R. Sousa Machado do original inglês "Timewarps"), 151 pp.

Sem interesse nenhum. Se o leitor não sabe o que é o tempo não é por aqui que vai passar a saber o que é. O título também não é feliz. A palavra "trama" tem conotações na língua portuguesa que não são propriamente as mais recomendáveis.

- F. Jacob, "A lógica da vida", Col. Ciência Nova, Publicações D. Quixote, Lisboa, 1985, 2ª ed. (tradução de J. Serra e M. Palmeirim, revista por P. V. Dionísio, do original francês "La logique du vivant" das Ed. Gallimard, 1970), 308 pp.

Um clássico da biologia de um Prémio Nobel da Medicina. Tem lugar em qualquer estante.

- I. Kritchewski e I. Petrianov, "O que é a termodinâmica", Mir, Moscovo, 1984 (tradução de A. Kutchumov do original russo da Mir, 1975), 180 pp.

Pequeno mas bem fundamentado livro sobre termodinâmica. Há por aí muita confusão sobre o significado de energia e entropia, nomeadamente nalguns livros escolares. Este volume pode ajudar a pôr as ideias em ordem.

• J. E. Lovelock, "Gaia. Um novo olhar sobre a vida na Terra", Edições 70, Lisboa, 1989 (tradução de "Gaia – a new look at life on earth", Oxford University Press, 1979). Existe uma outra edição (pirata!) do mesmo livro; Via Óptima, Porto, 1987.

A teoria de "Gaia" parece estranha e é-o de facto. Segundo essa teoria, a Terra seria um planeta vivo, i.e. a vida na Terra seria um efeito global decisivo para o processo de evolução planetário. O livro é curioso. A teoria tem um certo atractivo poético e, além disso, é um exemplo de ciência que começa por ser alternativa para passar a ser cada vez mais oficial.

• J. E. Lovelock, "As eras de Gaia – Uma biografia da nossa Terra Viva", Publicações Europa América, Mem Martins, 1990 (tradução de L. Rodrigues do original inglês, 1988, "The ages of Gaia"), 178 pp.

Continuação do livro anterior, acrescentando explicações mais pormenorizadas (por exemplo, a simulação computacional do "Planeta das Margaridas") numa altura em que vários dados parecem abonar a hipótese de Gaia. A controvérsia sobre "Gaia" não está porém terminada. O leitor devia ler para se inteirar do que trata esta "gaia ciência" (Nietzsche que perdoe o trocadilho!). Nota: O subtítulo no interior não corresponde ao da capa: vem "Uma biografia do nosso planeta vivo"...

• L. Margulis e D. Sagan, "Microcosmos – Quatro biliões de anos de evolução biológica", Edições 70, Lisboa, 1990 (tradução de L. Guterres do original norte-americano "Microcosmos", Summit Books, 1986), 259 pp.

L. Margulis é a primeira mulher de C. Sagan e não D. Sagan (há quem possa comprar o livro ao ver o nome Sagan na capa). Bióloga ilustre, amiga de J. Lovelock e da "hipótese de Gaia", Margulis não quis deixar a escrita apenas ao ex-marido, ocupando-se neste livro dos micróbios e da sua história (a propósito do ex-marido, a segunda mulher de C. Sagan, A. Druyan, é co-autora do belo livro ilustrado "Cometa" que saiu na Gradiva).

• I. Prigogine e I. Stengers, "Entre o tempo e a eternidade", Gradiva, Lisboa, 1990 (tradução de F. Fernandes e J. C. Fernandes do original francês "Entre le Temps et l'Éternité", Fayard, 1988, prefácio e revisão científica de Jorge Buescu), 267 pp.

Apesar do prefaciador, J. Buescu, alertar para a dificuldade deste livro, ele deve sem dúvida ser recomendado. O Prémio Nobel da Química Prigogine volta aos terrenos já explorados em "A Nova Aliança", publicado pela Gradiva na mesma colecção, aprofundando alguns aspectos (a investigação progride e passaram quase dez anos sobre o primeiro livro). Os autores conseguem convencer sobre a sua tese central: o tempo existe em todo o lado!

• J. Rifkin (colaboração com T. Howard), "Entropia, uma visão nova do mundo", Universidade do Algarve, Faro, s.d.

(1987?) (tradução de Henrique de Barros do original norte-americano, "Entropy – a new world view"), 376 pp.

Um livro mau de alguém que montou nos Estados Unidos um "lobby" bem organizado contra a empresa científica (as últimas diatribes de Rifkin dirigem-se contra a biotecnologia). Com a palavra "entropia" e com a "segunda lei da termodinâmica" pretendem-se englobar coisas demais. A crítica que saiu na revista CTS, nº 3, Set./Dez. 1988, p. 79, deu origem a uma curta polémica (Rifkin não vale grandes polémicas...). A tradução é razoável mas a gralha no nome do autor na capa é imperdoável.

• C. Sagan, "O cérebro de Broca – A aventura da ciência", Gradiva, Col. Ciência Aberta, Lisboa, 1987 (tradução de M. do Rosário Pedreira, revista por A. M. Baptista, do original inglês "Broca's Brain"), 297 pp.

Um dos títulos mais vendidos de Sagan. Prosa escorreita e cativante sobre isto e sobre aquilo.

• E. Schroedinger, "O que é a vida? Espírito e Matéria", Fragmentos, Lisboa, 1989 (tradução de M. Pinheiro do original inglês "What is Life & Mind and Matter", Cambridge University Press, 1944), 160 pp.

O primeiro texto, que dá o título ao volume, é um clássico da biologia, embora desactualizado (impunham-se algumas notas!). O Cap. VI fala de "Ordem, desordem e entropia". O segundo texto já tinha sido publicado em português pelas Publicações Europa América, sob o título de "Vida, Espírito e Matéria". Schroedinger foi um dos autores da mecânica quântica, tendo sido co-responsável pelo nascimento da biologia moderna nos anos cinquenta, com os trabalhos de M. Delbrueck e tantos outros cientistas brilhantes que, em vez de uma carreira na física, fizeram fama na biologia. Nota: O título escolhido engana porque "Espírito e Matéria" não é a resposta à questão "O que é a vida?" Falta um "e" entre as duas coisas.

• R. Shapiro, "Origens. A criação da vida na Terra – um guia para o céptico", Gradiva, Lisboa, 1986 (tradução de J. Buescu do original inglês "Origins. A Skeptics guide to the creation of life on Earth", Summit Books, 1986), 389 pp.

Um bom relato sobre as possíveis teorias da origem da vida. A falta de figuras torna-o porém um pouco maçudo.

À semelhança do artigo anterior, apresentam-se aqui algumas sugestões para publicação. Note-se que dos 16 livros indicados da última vez foram já publicados 7. Espera-se que algo de semelhante venha a suceder de novo. Excluem-se aqui os livros cuja publicação já está em curso, tanto quanto é do meu conhecimento.

1. Física Relativista

• A. Pais, "Subtle is the Lord", Oxford University Press, 1982.

A biografia definitiva de Einstein. Devia fazer parte das bibliotecas de todas as línguas, incluindo o português.

• L. C. Epstein, "Relativity visualized", Insight Press, S. Francisco, 1981.

Do mesmo autor do interessantíssimo livro de perguntas e

respostas "Thinking Physics" (Insight Press, 1985) uma visão bastante pessoal e ilustrada da teoria da relatividade.

2. Física Quântica

• N. David Mermin, "Boojums all the way through. Communicating Science in a Prosaic Age", Cambridge University Press, 1990.

O autor é físico da matéria condensada da Universidade de Cornell. Escreve bastante bem sobre vários temas da física. O segundo e terceiro capítulos tratam da teoria quântica e da relatividade. O senão do livro é a relativa heterogeneidade dos textos, que vieram a lume em sítios diferentes e em datas diferentes. A palavra "boojum" do título foi retirada a L. Carrol ("The hunting of the snark") e serve para designar um fenómeno de física do hélio. Num dos textos Mermin conta de forma hilariante as suas desesperadas tentativas para introduzir essa palavra nova no vocabulário da física.

• A. Guinier e R. Jullien, "The solid state. From superconductors to superalloys", Oxford University Press, 1989.

Os físicos do estado sólido queixam-se que os físicos de partículas consomem o dinheiro todo dos contribuintes, com os seus superaceleradores, enquanto a física do estado sólido tem muito mais aplicações tecnológicas. Este livro faz uma introdução moderna à física do estado sólido, que um pouco injustamente tem andado arredada da divulgação científica.

3. Física Nuclear e de Partículas

• P. C. Davies e J. Brown (eds.), "Superstrings. A theory of everything?", Cambridge University Press, Cambridge, 1988. Um conjunto de entrevistas com físicos sobre as supercordas, a grande promessa para a concretização de uma teoria unificada das forças. Este livro é do mesmo género de "The ghost in the atom" ("O átomo assombrado") que vai ser publicado pela Gradiva. Entre os entrevistados contam-se os prémios Nobel Salam, Glashow, Feynman e Weinberg. Feynman faz de "bota de elástico". Confessa-se demasiado velho para essas teorias novas...

• S. Glashow, com B. Bova, "Interactions. A Journey through the mind of a particle physicist and the matter of this world", Warner Books, 1989.

Este livro, com uma foto um tanto ou quanto sensacionalista do autor na capa, é a resposta do Prémio Nobel S. Glashow às incursões de alguns dos seus colegas pelos domínios da divulgação científica. Um bom livro, com bastantes pormenores autobiográficos de um dos principais protagonistas da unificação das forças.

4. Astrofísica e Cosmologia

• C. Chapman e D. Morrison, "Cosmic catastrophes", Plenum, 1989.

Agora que o "catastrofismo" virou moda em astrofísica, um cientista planetário e um astrónomo fazem uma introdução ligeira ao assunto.

• J. P. Petit, "Big Bang", Les Aventures d'Anselme Lanturlu, Ed. Belin, 1987.

As edições de banda desenhada de Anselmo o Curioso, iniciadas pelas Publicações D. Quixote, inexplicavelmente

acabaram. Ora há ainda bastantes livros do Anselmo à espera de leitores portugueses. Este "Big Bang", por exemplo, ou a sua continuação "Mille Milliards de Soleils!", Belin, 1989.

• J. Silk, "The Big Bang", edição revista e actualizada, Freeman, 1989.

Trata-se de uma reedição de um livro de 1980 que pode ser considerado já um clássico da astrofísica. Bem ilustrado e com a qualidade das edições da Freeman. A sua leitura não é muito fácil mas os clássicos não têm que ser fáceis.

• J. Trefil, "The dark side of the universe", Scribners, 1988. Um livro divertido sobre a "matéria escura" que constitui a maior parte do universo. A diversão provém de títulos como "Cinco Razões pelas quais as galáxias não deviam existir", etc., J. Trefil é também, o autor de "Reading the Mind of God: in search of the principle of universality", Scribners, 1989.

5. Fenómenos irreversíveis (termodinâmica, biologia, etc.)

• P. W. Atkins, "The second law", Freeman, 1984.

Um livro sobre a famosa segunda lei da termodinâmica que para C. P. Snow era tão importante como as obras de Shakespeare. Recomenda-se este livro porque se trata de um reputado físico-químico da Universidade de Oxford, porque circula muita confusão sobre o que é a entropia e, "last but not least", porque a edição, bem ilustrada, tem a qualidade que caracteriza a "Scientific American Library" da Freeman. Os programas em Basic no final para um Apple já estão desactualizados, com a evolução da informática.

• R. Bakker, "The dinosaur heresies", Longman, 1986, republicado pela Penguin.

Não é um livro de física mas um livro com desenhos magníficos (do próprio autor!) sobre dinossauros. Acontece que, com a história do impacto cósmico, os físicos se têm interessado cada vez mais pela vida e morte dos dinossauros. O autor, curador do Museu da Universidade do Colorado, é um artista da escrita e da ilustração. Trata-se do melhor livro de dinossauros que anda por aí.

• I. Ekeland, "Le calcul, l'imprévu. Les figures du temps de Kepler à Thom", Ed. du Seuil, 1984.

O autor é um famoso matemático francês. Este livro procurava ser uma introdução à teoria das catástrofes mas acabou por se tornar não só isso mas também uma interessantíssima introdução às teorias do caos. Já foi traduzido para inglês, numa edição da University of Chicago Press.

• J. B. Fenn, "Engines, energy and entropy", Freeman, 1982. Introdução ligeira, recheada de "cartoons", à termodinâmica e à entropia.

• E. Jantsch, "Die selbstorganisation des Universum. Vom Urknall zum menschlichen Geist", C. Hanser, 1979 (edição de bolso da DTV de 1982).

Esta obra, com um prefácio de P. Feyerabend e dedicada a I. Prigogine, trata de um tema hoje muito em voga: a auto-organização dos sistemas naturais. Explica como as formas, em particular as da vida, podem aparecer em consequência da evolução. O autor, nascido em Viena e astrofísico por formação, foi conselheiro da OCDE e membro fundador do "Clube de Roma".

Congressos e Conferências

Maria Regina Tavares ^a

SETEMBRO 1990

2-4	Rio de Janeiro (B)	IV Encontro Brasileiro de Síntese Orgânica
2-7	Tübingen (RFA)	ICSM'90
3-7	Leuven (B)	1st International Conference on F-Elements
3-7	Balatonfüred (Hungria)	6th Symposium on Ion Exchange
9-12	Paris (F)	International Symposium on Mechanisms and Kinetics of Polymerization Reactions: Their Use in Polymer Synthesis
10-12	Bristol (GB)	Colloidal Dispersions
10-13	Basel (S)	1st IUPAC Workshop on Safety in Chemical Production
10-14	Caithness (GB)	EXTRACTION'90 Extraction from Dilute Solutions
10-16	Gamisch (RFA)	2nd International Conference on Plasma Surface Engineering
11-14	Kode (J)	12th International Symposium on Capillary Chromatography
23-28	Amsterdam (Holanda)	18th International Symposium on Chromatography
23-28	Salamanca (E)	XXIIIrd Biennial Meeting of the Spanish Royal Society of Chemistry
24-27	Kyoto (J)	3rd International Aerosol Conference
25-27	Köln (RFA)	ESOPS 9 9th European Symposium on Polymer Spectroscopy

OUTUBRO 1990

1-4	Avignon (F)	Chimie Théorique et Synthèse Organique (EUCHEM) *
2-5	Poitiers (F)	2nd International Symposium CNRS on Heterogeneous Catalysis and Fine Chemicals
10-12	Kassel (RFA)	Elektrochemie in Energie
15-17	Karlsruhe (RFA)	EUROSENSORS IV
15-20	Schlob Elmau (RFA)	ELMAU 3 Computational Methods in Chemical Design Molecular Modeling
23-25	Viena (A)	ENVIROTECH VIENNA 1990
31-2	Montreux (S)	7th Symposium on Liquid Chromatography – Mass Spectrometry

NOVEMBRO 1990

5-7	Barcelona (E)	5th Mediterranean Congress on Chemical Engineering
7-9	Singapore	IUPAC International Symposium on Speciality Polymers
13-16	Londres (GB)	6th International Conference on Quantitative Surface Analysis

OUTUBRO 1991

21-25	Budapest (Hungria)	EUROCORR'91
-------	--------------------	-------------

JUNHO 1992

1-4	Espoo (Finlândia)	EUROCORR'92
-----	-------------------	-------------

* Delegado SPQ ao EUCHEM: Prof. José Luís Figueiredo, Faculdade de Engenharia do Porto, 4099 Porto Codex

^a LNETI Departamento de Tecnologia de Indústria Química, Estradas das Palmeiras, 2745 Queluz.

Sociedade Portuguesa de Química

Av. da República, 37 - 4.º P - 1000 LISBOA

Boletim de inscrição da

International Newsletter on Chemical Education – versão em português –

Nome _____

Morada _____

	N.º Exemplares	Total
N.º 1 (1986) – Mendeleev	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º 2 (1988) – Ciência - Tecnologia - Sociedade	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º 3 (1988) – Química no ensino secundário	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º especial (1988) – Segurança em laboratórios escolares	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º 4 (1989) – 9.ª Conferência de Educação em Química	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º 5 (1989) – Computadores	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º 6 (1990) – N.º genérico	@ 175\$ _____	_____ \$
N.º 7 (1990) – Química no ensino primário	@ 175\$ _____	_____ \$
	Total	_____ \$

Junto envio o cheque n.º _____ do banco _____
correspondente ao total acima indicado.

A Escola onde lecciona fez assinatura da Newsletter (versão em português)? _____

Gostaria de colaborar nesta publicação? Em caso afirmativo indique como (tradução de 1
ou 2 artigos por ano, revisão, montagem, ...) _____

Data _____

Assinatura _____

* Veículo de comunicação do Comité do Ensino da Química da IUPAC (IUPAC - CTC)

boletim

SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE
QUIMICA



O Boletim da Sociedade Portuguesa de Química é o melhor suporte para tomar contacto com os químicos e engenheiros químicos portugueses e com as instituições e firmas que os empregam

Para as suas inserções publicitárias escreva para a Sociedade Portuguesa de Química, Av. da República, 37, 4.º - 1000 Lisboa ou telefone para 793 46 37 (Cristina Silva Macário)

NORMAS PARA A PUBLICAÇÃO DE ORIGINAIS NO BOLETIM

1. Os originais devem ser enviados em 3 exemplares (dactilografados) em envelope dirigido ao director do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, Av. da República, 37, 4.º, 1000 LISBOA.
2. Os originais não devem exceder, na generalidade, 15 páginas dactilografadas a 2 espaços.
3. As gravuras, desenhos, esquemas e outras figuras que acompanhem os originais devem estar numeradas e acompanhadas das legendas correspondentes. A qualidade das ilustrações deve permitir uma boa reprodução. As fórmulas complexas devem ser preparadas como ilustrações.
4. Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores.
5. As regras de nomenclatura a utilizar devem ser exclusivamente as regras recomendadas pela IUPAC.
6. Compete à Direcção do Boletim a aceitação da publicação de qualquer original que lhe seja submetido. Em caso de dúvida sobre o interesse desta, o original será submetido a apreciação por, pelo menos, dois especialistas sócios da SPQ designados pela Direcção do Boletim.

PREÇO DA PUBLICIDADE POR NÚMERO DO «BOLETIM»

Página interior (só preto)

1/2 página	20000\$00
1 página	30000\$00

Página interior (a cores)

1/2 página	30000\$00
1 página	40000\$00

Capa 3 (só preto) 40000\$00

Capa 3 (a cores) 50000\$00

Pequena Crónica Arqueológica	7
Modelo de Resolução de Problemas	11
Trabalho Experimental	17
Partícula na Caixa	23
Deposição Electroless	27
Condensação de Michael	31
Redox Tiocianato – Perclorato	37
Um Curso Prático de Cinética Química (parte 3)	41
Divulgação Científica em Portugal	47