

ANTÓNIO VARANDAS, PRÉMIO FERREIRA DA SILVA

“Apoiar a investigação aplicada em detrimento da fundamental seria um erro crasso”

Portugal ainda não atingiu o excesso tecnológico, razão que leva A. J. C. Varandas, Professor do Departamento de Química da Universidade de Coimbra e galardoado com o prémio Ferreira da Silva pelo conjunto de uma actividade de investigação desenvolvida nos últimos anos, a afirmar a “Química” que o “nosso organismo científico” tem cuidado mais das “necessidades imediatistas”. Todavia, acrescenta, “a investigação fundamental deve ser incentivada em todos os seus domínios”, de modo a evitar uma “visão mercantilista da Ciência e uma excessiva tecnocracia”.

Mas não se falou apenas do papel do Estado no financiamento da investigação. Os seus estudos, nomeadamente em combustão preenchendo e química atmosférica, ocuparam parte significativa da viva e longa entrevista que nos concedeu.

Química – Foi-lhe atribuído o Prémio Ferreira da Silva 91, o que contempla um determinado trabalho. Gostaria que nos falasse um pouco sobre o significado deste prémio.

António Varandas – O Prémio Ferreira da Silva não contempla um trabalho específico, mas o conjunto de uma actividade desenvolvida em passado recente, sendo a candidatura apresentada sob proposta de uma Comissão*. No entanto, estou convencido de que, daquilo que fiz nos últimos anos, o que terá tido mais impacto tem a ver com o cálculo e a representação analítica de superfícies de energia

* Nota: O Regulamento do Prémio Ferreira da Silva foi publicado no Boletim n.º 5 (1981).



potencial, isto é, a função potencial que rege o movimento dos núcleos numa molécula, ou supermolécula correspondente à espécie intermediária de uma reacção química. Neste domínio, penso que o grupo de investigação que dirijo em Coimbra deu um contributo bastante original, passe a imodéstia.

Química – Essa sua equipa envolve quantas pessoas? Fale-nos desse núcleo de investigadores.

A.V. – É uma equipa relativamente pequena embora o INIC a tenha considerado com dimensão apreciável para o tipo de domínio, do que me permito discordar. Trata-se de um grupo de investigadores, em que sou o único Professor, todos os restantes elementos são investigadores em vias de preparação de doutoramento ou recém-doutorados. Destes meus colaboradores, apenas dois têm vínculo à Universidade de Coimbra. Dos restantes, dois são espanhóis, concluíram já os seus doutoramentos e regressaram a Espanha. Um destes, docente da Universidade de Salamanca, continua a manter comigo trabalho de colaboração. Um outro

colaborador, da Universidade do Porto, também concluiu já o seu doutoramento, mantendo igualmente trabalho de colaboração comigo. Vejo-me, pois, novamente reduzido a um núcleo de três investigadores. Esta situação é pouco comum entre nós, dado que em grande parte dos casos os doutorandos têm vínculo institucional, o que leva os grupos a um crescimento permanente. No meu caso tal não aconteceu.

Química – Porque não houve um crescimento orgânico do núcleo de investigação?

A.V. – Sucedeu aquilo que normalmente sucede em instituições estrangeiras. Por exemplo, após ter concluído o meu doutoramento sob a orientação do Professor J. N. Murrell, na Universidade de Sussex, outro estudante de pós-graduação terá entrado para o grupo. Também em Coimbra, após a saída dos três doutores a que aludi, acaba de entrar, financiado pela JNICT, um jovem estudante para preparação de doutoramento, havendo perspectivas para entrada de um outro. Refira-se ainda que, recentemente, houve a possibilidade de vinda de dois

A. J. C. Varandas: perfil breve de um investigador

A. J. C. Varandas iniciou os seus estudos universitários em Coimbra, tendo-os concluído na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto em 1971 com a licenciatura em Engenharia Química-Industrial. Revelando grande aptidão para matérias de índole teórica, decidiu após conclusão da licenciatura regressar a Coimbra onde iniciou trabalhos de investigação no domínio das Forças Intermoleculares de longo alcance usando teoria das perturbações. Destes estudos resultaram quatro artigos em revistas internacionais da especialidade, um dos quais da sua exclusiva autoria.

Em 1973 iniciou a sua tese de doutoramento em Química Teórica sob a orientação do Professor John N. Murrell em superfícies de energia potencial. Efectuou então cálculos mecânico-quânticos em dímeros de gases raros usando teoria das perturbações com simetriação da função de onda, cálculos *ab initio* por métodos supermoleculares e desenvolveu modelos semiempíricos de superfícies de energia potencial para uso em estudos de dinâmica molecular. Da sua tese e ainda de outros trabalhos feitos em colaboração resultaram sete artigos, um dos quais foi apresentado na Faraday Discussion of the Chemical Society em 1977. A sua estadia em Sussex contribuiria para marcar profundamente a sua investigação futura através do estabelecimento de uma colaboração estreita com a Universidade de Sussex após o seu regresso a Coimbra. Tal colaboração culminaria com a escrita de um livro "Molecular Potential Energy Functions" (Wiley, 1984), que constitui o primeiro estudo monográfico dedicado a este tema.

É, desde 1988, Professor Catedrático de Química na Universidade de Coimbra.

O seu currículo conta com mais de oitenta trabalhos científicos publicados em revistas de excelente qualidade, com realce para alguns dos

aspectos mais relevantes da sua investigação nos últimos cinco anos, que se distribui pelas áreas da Estrutura Electrónica Molecular, Forças Intermoleculares, Superfícies de Energia Potencial e Dinâmica das Reacções Químicas.

A actividade científica de A. J. C. Varandas tem-se dirigido ao estudo teórico-computacional da energética e dinâmica de reacções químicas elementares. Com relevância em áreas de interesse prático e social como seja o desenvolvimento de *lasers* e a compreensão e modelagem da química da atmosfera e dos processos de combustão, além do interesse científico *per se*, os estudos que desenvolve assentam num formalismo matemático elaborado e num forte recurso ao computador.

Poder-se-á dizer que são duas as etapas fundamentais envolvidas no estudo teórico de uma reacção química elementar. Na primeira é calculada a função ou superfície de energia potencial que rege o movimentos dos núcleos, enquanto que na segunda são resolvidas as equações de movimento destes últimos sob a acção daquele potencial. Qualquer destas etapas representa por si só um problema computacional complicado que necessita para uma resolução eficiente de bons meios de cálculo científico intensivo.

Na impossibilidade de um cálculo exacto do potencial molecular para a maioria das reacções químicas, torna-se imperioso recorrer a métodos semiempíricos em que se impõem ao potencial certos atributos essenciais aos estudos dinâmicos. É neste contexto que surge, plenamente desenvolvido por A. J. C. Varandas, o método conhecido por "expansão dupla multicorpos" ou DMBE (da sua designação em inglês "double many-body expansion"). Combinando judiciosamente cálculos de estrutura electrónica molecular com informação experimental, A. J. C. Varandas

põe, pela primeira vez, em devida apreciação o papel importante das forças intermoleculares de longo alcance em estudos de dinâmica química mesmo no caso de reacções que ocorram sujeitas a uma barreira de energia potencial. Apesar de recente, este seu método conta já algumas aplicações de apreciável sucesso, como seja a melhor superfície de energia potencial publicada para o sistema formado por três átomos de hidrogénio (H_3) – um protótipo fundamental da reactividade molecular – e a mais rigorosa publicada até ao presente para qualquer espécie poliatómica. Também a superfície DMBE para o estado fundamental do radical hidroperóxido (HO_2) tem sido reconhecida como a mais realista existente para este sistema de grande importância em química dos processos de combustão. Este método por si desenvolvido goza de reconhecido prestígio internacional, sendo os potenciais DMBE muito utilizados em estudos de dinâmica molecular.

Usando potenciais DMBE, A. J. C. Varandas publicou ainda vários estudos sobre dinâmica de reacções químicas elementares, destacando-se os sistemas hidrogénio-oxigénio com importância para a compreensão dos processos de combustão e química da atmosfera, nomeadamente do ciclo de depleção do ozono. Para a interpretação da energética de uma reacção química elementar e racionalização da correspondente dinâmica, propôs ainda um esquema inovador conhecido por "diagrama triangular optimizado" que permite a visualização do potencial molecular bem como trajectórias que nele ocorram. Publicou também estudos sobre caos determinístico em sistemas poliatómicos pequenos com vista à elucidação de reacções unimoleculares.

Recebeu o Prémio Artur Malheiros Ciências Físicas e Químicas 1985 da Academia das Ciências de Lisboa

estudantes chineses, o que só não aconteceu por razões burocrático-políticas a que não vale a pena aludir.

Química – *Mas há uma componente internacional na sua investigação, para além dessas colaborações que referiu. O facto de dois investigadores chineses quererem vir trabalhar consigo resulta do seu trabalho ser conhecido no exterior, ou é comum receberem-se tais pedidos?*

A.V. – Não creio que seja comum, pelo menos ao nível de estudantes para preparação de doutoramento. Julgo poder dizer que se deve em parte ao reconhecimento internacional de que falou, pelo menos assim concluo das respectivas cartas para pedido de ingresso. O mesmo penso ter-se passado com os estudantes espanhóis. Todavia, embora tenha sido até aqui algo afortunado, sinto que existe uma dificuldade real em cativar estudantes para a investigação no domínio teórico.

Química – *Porquê?*

A.V. – Penso ser uma questão de mercado de emprego e também de política científica nacional. Talvez se julgue que a saturação do mercado se atinge mais facilmente para os químicos teóricos, o que duvido, dada a sua preparação químico-computacional. Ou se pense que “fazer química teórica é um luxo”, talvez porque os resultados alcançados poderão não ter uma aplicação imediata. Por outro lado, trata-se de um domínio mais abstracto, para o qual são, em geral, atraídos alunos com uma maior inclinação para a física e matemática. Finalmente, é de referir que a Química, talvez por se tratar de uma ciência clássica, não constitui actualmente um dos principais pólos de atracção para os estudantes que ingressam nas universidades. Talvez a Comunicação Social possa ter nesta matéria um papel importante, tentando impedir que seja distorcida a realidade científica nacional. Enfim, a dificuldade em conseguir alunos para a Química Teórica existe...

“EXPLOÇÃO” DE BOLSAS

Química – *As orientações estratégicas recentes apontam para rentabilizar a curto prazo os*

investimentos em investigação o que implica o deslocamento dos investigadores para áreas aplicadas. Até que ponto isso constitui uma dificuldade no seu caso?

A.V. – Constitui, certamente, uma dificuldade adicional, ficando-se a dever exclusivamente à falta de visão de quem negligenciar o papel importantíssimo da investigação fundamental. Refira-se, aliás, que o termo “área aplicada” é difícil de definir, se bem que eu entenda o que se quer dizer. Referirei, contudo, que os estudos teóricos podem ter aplicação imediata em muitos casos, nalguns suprimindo mesmo informação impossível, ou difícil, de obter pela via experimental.

Química – *Mas não é só um problema quantitativo. A qualidade também conta...*

A.V. – Concordo inteiramente.

Química – *Mas as pessoas actualmente também têm que ponderar o que vão fazer depois do doutoramento, mesmo que tenham interesse por uma dada área. Houve até aqui grandes facilidades na concessão de bolsas para doutoramento. Mas, e depois deste concluído?*

A.V. – Embora o processo seguido tenha contribuído para aumentar o número de investigadores, o que considero positivo, a eventual necessidade de baixar o nível de exigência, face ao apreciável número de bolsas a atribuir e ao escasso número de candidatos disponíveis, pode vir a ter consequências perniciosas. A gravidade da situação criada com a súbita explosão do número de bolsas é, pois, preocupante, principalmente nas universidades. Efectivamente, não considero nula a probabilidade de um bom aluno poder, no futuro, vir a ter dificultado o seu ingresso na carreira universitária em consequência do número de doutores resultante desta “explosão”, a menos que a admissão na própria carreira seja alterada. Também a perspectiva de melhor sucesso face ao mercado empregador, ou seja, a Indústria, deverá melhorar para os doutorandos. Não estou certo de que tal esteja a acontecer, embora pense que esse é o caminho correcto, aliás seguido noutros países.

Química – *Como vê toda esta situação em torno da extinção do INIC?*

A.V. – Com preocupação, pois a maior parte da minha investigação tem contado com o apoio do INIC. Não que as verbas de que tenha beneficiado tenham sido vultuosas, ou até mesmo suficientes, mas porque penso que o princípio da existência de um órgão de coordenação da investigação científica a nível nacional está correcto. De facto, uma visão meramente regionalista da investigação pode encerrar muitos perigos. Assim, não me preocuparia a extinção do INIC, se, antes desta consumada, se tivesse optado pela criação de uma estrutura hierarquicamente superior, por exemplo, um ministério para a investigação científica. De momento, tudo me parece incerto e confuso.

ESTIMULAR INVESTIGAÇÃO FUNDAMENTAL

Química – *Mas a preocupação actual parece ser de apoiar a investigação aplicada em detrimento da fundamental...*

A.V. – Obviamente que penso ser um erro crasso. Ainda há dias li, num jornal diário, uma entrevista com Kenichi Fukui, Prémio Nobel da Química, onde se afirmava que a tecnologia estaria demasiado exarcebada relativamente à ciência fundamental. Usando a analogia daquele cientista, tal como o organismo humano se satura de um determinado alimento ou de uma necessidade biológica, também o organismo científico se deveria saturar com o excesso tecnológico. Mas nós (Portugal) ainda não atingimos o excesso tecnológico, e daí o nosso “organismo científico” cuidar mais das necessidades imediatistas. Penso, pois, que a investigação fundamental deve ser estimulada, por si mesma, em todos os seus domínios, todos eles de igual relevância, não me parecendo correcto privilegiar a investigação aplicada em detrimento da fundamental. Deve-se evitar uma visão mercantilista da Ciência e uma excessiva tecnocracia. A perspectiva que traçou para a investigação fundamental é, pois, preocupante, embora, felizmente, essa política não me pareça ser seguida noutros países da Comunidade

Europeia, mesmo em muitos com dimensão semelhante à nossa.

Química – *Como a Holanda, a Suíça, a Bélgica...?*

A.V. – Sim, e a Espanha também. Nestes países julgo que o investimento em investigação científica é significativamente maior. É certo, como dizem alguns colegas meus espanhóis, que a investigação científica portuguesa é de boa qualidade. Porém, tal constatação não chega, podendo, em parte, traduzir apenas uma maneira simpática de omitir a desproporção no volume da investigação efectuada nos dois países da Península Ibérica, tido em conta, naturalmente, o *ratio* do número de investigadores.

Química – *Essa diferença resulta de quê?*

A.V. – Certamente que de vontades políticas diferentes...

Química – *Apesar do cenário pouco brilhante, não se vislumbra nas suas palavras a ideia de desistência. Como perspectiva o futuro da sua investigação?*

A.V. – De modo nenhum a ideia de desistência, pois vencer dificuldades é, naturalmente, apanágio de qualquer cientista... As que referi são criadas pelo Homem, mas tudo farei também para vencê-las. Só assim se poderá compreender que, em matéria de cálculo, a situação nunca tenha sido tão boa em Coimbra como é actualmente. Efectivamente, com a ajuda de alguns colegas, foi possível adquirir para a Universidade de Coimbra, através do Programa Ciência, um supercomputador VAX 9000-210VP, o que confere um poder de cálculo pelo menos dez vezes superior ao até aqui disponível. Só que, com a autonomia das Universidades, veio também a necessidade de o tempo de cálculo ter que ser suportado pelos utilizadores. E estes custos podem atingir verbas apreciáveis, pois uma hora de cálculo pode ascender a uma dezena de milhares de escudos, ou mesmo mais, consumindo o meu grupo dezenas de horas de cálculo por semana. Surge, assim, uma nova dificuldade, que encontra agravantes na indefinição, espero que momentânea, vivida

actualmente em matéria de política de investigação. Mas desta já falámos o suficiente.

PAPEL DO ESTADO

Química – *Há grandes dificuldades para o próprio pagamento de artigos...*

A.V. – Alguma, mas esse é um problema menor. Um que certamente considero bastante mais grave no meu caso, é o não ter ainda tido a oportunidade de contratar qualquer investigador graduado, entenda-se "pós-doc", que me auxilie no desenvolvimento de novos projectos de investigação. E não é porque tal não tenha, com insistência, solicitado nos meus relatórios de investigação para o INIC, pese também a apreciação muito meritória que é feita da actividade científica que desenvolvo. Talvez a Comunicação Social possa também aqui ajudar, dando a conhecer, com realismo e objectividade, o que se faz no estrangeiro nesta matéria. Efectivamente, só tive um colaborador pós-doutorado, neste caso uma investigadora espanhola da Universidade de Valladolid, embora subsidiada por Instituições do seu país...

Química – *Ao longo da nossa conversa já falou várias vezes da Comunicação Social. Até que ponto os vários investigadores não têm também descurado um pouco o "marketing" da investigação? Dou-lhe um exemplo: é mais fácil aos jornalistas portugueses falar com um Prémio Nobel americano do que com um investigador português do qual se quer conhecer o trabalho.*



A.V. – Desconhecia totalmente essa situação. Acho mesmo caricato que tal possa acontecer. Contudo, se não houver equilíbrio na abordagem dos vários domínios científicos, então a Comunicação Social pode agravar ainda mais a distorção na procura dos vários cursos universitários, devido à menor novidade que certos domínios possam ter, particularmente, como já frisei, os mais clássicos, onde incluo a Química. Assim, o contributo da Comunicação Social, para ajudar a reequilibrar uma sociedade que tem tendência a desequilibrar-se devido ao exacerbar das necessidades mais imediatistas é, certamente, importante.

Química – *Mas essas correcções não deverão ser antes feitas pelo poder público?*

A.V. – Sem dúvida que sim, em grande parte. Mas não quero deixar de bater também à porta da Comunicação Social... Ao Estado reservaria duas tarefas de extrema importância: financiar com objectividade e universalidade a investigação, sobretudo, naturalmente, a fundamental, e coragem política para, uma vez garantidas boas condições de trabalho, exigir produção de investigação científica de boa qualidade, e em quantidade compatível com a dimensão da comunidade científica portuguesa. Só assim se poderá compatibilizar, por exemplo, qualidade da investigação produzida com justiça na progressão académica universitária. Uma outra missão que ao Estado deve caber, não menos importante que as que já referi, é, naturalmente, o dever de dignificar a carreira universitária através de remunerações dignas e justas.

INVESTIGAÇÃO É ESSENCIAL

Química – *De qualquer maneira, em relação a esta evolução que se verifica na comunidade científica portuguesa, também é um bocadinho uma crise de crescimento, porque nos anos 60, por exemplo, e salvo raríssimas excepções, não havia praticamente nada em termos de investigação.*

A.V. – Gostaria de discordar um pouco dessa afirmação, dependendo da perspectiva como o problema é encarado. Não há dúvida que, em

termos absolutos, a produção científica actual é bastante maior. Contudo tal pode reflectir apenas a maior dimensão da comunidade científica portuguesa actual e o maior intercâmbio científico-cultural com outros países. Mas a motivação para fazer investigação e para seguir uma carreira universitária talvez não seja maior actualmente. Por exemplo, a nível económico, quando em 71,72 iniciei a carreira académica, ou mesmo como tirocinante no meu segundo ano de Universidade, auferia vencimentos que me permitiam, nas circunstâncias, viver tão ou mais desafogadamente do que agora, passe a comparação. Finalmente, não me parece correcto pensar-se que o equipamento científico adquirido na década de 60 fosse menos sofisticado do que o que actualmente dispomos. É uma questão de evolução.

Química – Mas isso foi já depois de terem começado os bolseiros do Instituto de Alta Cultura, antes disso não havia praticamente nada.

A.V. – Claro.

Química – Bom, por exemplo em termos de publicações científicas se comparar o que é feito hoje pela comunidade química portuguesa com o que era feito nos anos sessenta...

A.V. – Sim, parece-me um índice de avaliação plausível. Só que deverá ser feita a comparação com o que acontecia noutros países na mesma época...

Química – Ainda estamos abaixo...

A.V. – Creio que sim...

Química – Mas em relação ao que se passava nos anos 60, estamos muito melhor neste momento.

A.V. – Sobre alguns pontos de vista, sim, por exemplo, em se encarar a investigação científica como algo essencial para o desenvolvimento das nações, e não como uma actividade meramente académica. Todavia o empenhamento na motivação dos meios humanos e apetrechamento laboratorial não me parece, como já referi, compatibilizado com tal perspectiva. Basta ver a pobreza dos nossos

laboratórios..., o que é, certamente, muito desmotivador para os estudantes, futuros investigadores.

Química – Mas a tradição científica portuguesa não é grande, quando comparada com outros países europeus.

A.V. – Concordo, mas como disse, tudo passa por um padrão de comparação. Os países que na altura estavam em circunstâncias parecidas com as nossas, como por exemplo a Espanha, encontram-se agora melhor. Outros, como por exemplo a Inglaterra, que estavam em muitíssimo melhor situação, talvez estejam hoje menos bem posicionados. É um pouco o biorritmo dos países. Direi pois, que a saúde da nossa investigação não é sólida, mas acredito que se possa estar em fase de recuperação.

TERAPIAS E TERAPIAS

Química – Tem havido injeções bastante grandes de dinheiro para equipamento, mas quase nada para custos de operação...

A.V. – É isso. E obviamente que o equipamento não funciona sozinho...

Química – Corre-se o risco de ter o equipamento e de ele não poder funcionar, o que é um desperdício de dinheiro...

A.V. – Tem toda a razão. Acresce que a maioria dos investigadores seniores têm tarefas de gestão, o que é perfeitamente natural. Tal facto mais acentua a necessidade de se criarem posições de pós-doutoramento. Assim, diria que o dinheiro investido em ciência é bem-vindo e fundamental. Todavia, um remédio, mesmo que correctamente prescrito, se for tomado em doses excessivas, pode, actuando como um veneno, ser letal. A meu ver, a "terapia" correcta passa por doses adequadas, tomadas em tempo certo, dos vários "medicamentos", passe a analogia de alguém que é leigo em medicina.

Química – Voltando aos aspectos mais químicos gostava que nos falasse um pouco das aplicações que os seus estudos têm, nomeadamente em combustão e na química atmosférica.

A.V. – Começarei por dizer que o tema dos estudos realizados no meu grupo é, de certo modo, auto-contido, indo desde a determinação da superfície de energia potencial molecular, obtida por cálculos de estrutura electrónica, até ao estudo da dinâmica das reacções químicas que ocorrem sob a acção desses potenciais. Embora para o químico teórico, qualquer sistema possa ter igual interesse científico *per se*, não deixa de constituir uma motivação adicional o seu impacto prático ou social. Daí o termos prestado atenção especial ao radical hidroperóxido, HO₂, e à molécula de ozono, O₃, em ambos os casos no correspondente estado electrónico fundamental. O primeiro sistema representa a espécie intermediária das reacções O + OH → O₂ + H, responsável pela existência de oxigénio pulmonar na alta atmosfera, e sua inversa, H + O₂ → OH + O, considerada a reacção mais importante em combustão. Dedicamos também bastante atenção à reacção O + O₃ → 2O₂, processo elementar importante no equilíbrio do ozono na atmosfera, e que envolve o conhecimento da superfície de energia potencial para o estado tripleto fundamental do sistema O₄. Em ambos os casos os potenciais utilizados foram obtidos usando o método da expansão dupla multicorpos, por mim proposto em 1984, e internacionalmente conhecido pela sigla DMBE de *Double Many-Body Expansion*. Em suma, os nossos estudos vão do cálculo do potencial molecular ao cálculo do coeficiente termalizado de velocidade, isto é, à cinética, passando pelos parâmetros microscópicos de reactividade. Refira-se que os processos de combustão e a química atmosférica envolvem sistemas cinéticos multicomponente bastante complicados, portanto um número grande de reacções elementares. Estudámos apenas algumas dessas reacções, diria aquelas que mais influenciam a modelagem do processo multicomponente global, e que, portanto, devem ser conhecidas com pequena margem de erro.

VISAR A "ÁRVORE"

Química – Esses processos elementares que estudaram, para os quais determinaram as equações de Arrhenius, isto é, a dependência da constante de velocidade na tempe-

ratura, foram utilizados por investigadores estrangeiros para a modelação de reacções complexas.

A.V. – É possível, mas sobretudo como suporte aos resultados experimentais. Por exemplo, no caso da reacção $H + O_2$, e da sua inversa, foi gratificante a boa concordância obtida com medições recentemente efectuadas por grupos americanos, nomeadamente de Argonne, que se supõem ser as melhores existentes. Refira-se que os valores experimentais até hoje publicados diferem apreciavelmente entre si, daí o interesse e actualidade que os estudos teóricos continuam a ter, também por esta razão.

Química – Os estudos que tem desenvolvido tem sido com espécies pequenas, do monoatômico ao tetraatômico. Como vê a extensão a moléculas maiores?

A.V. – Começaria por frisar que o facto de estudar reacções elementares, envolvendo sistemas com poucos átomos, não se deve confundir com simplicidade, no sentido de banalidade. De facto, só nos últimos dois anos foi possível avançar significativamente no cálculo *ab initio* da reacção mais simples, a que envolve três átomos e três electrões. Estou, obviamente, a falar da reacção $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$. Refira-se, a propósito, que muitos destes estudos utilizaram o potencial DMBE para o sistema H_3 , publicado em 1987.

Química – Elementar, mas não trivial...

A.V. – Sim, nada trivial.

Química – Bom, mas a questão anterior era no sentido de saber se há neste momento alguma limitação que impeça que se avance para moléculas maiores...

A.V. – Conceptualmente, não há. No entanto, direi que em Ciência podem existir duas atitudes. Uma, minuciosa, pretende levar às últimas consequências e análise de um determinado sistema, modelo ou teoria. Visa-se a “árvore”, não a “floresta”. Outra, pretende ter uma visão global da “floresta” sem cuidar do que se passa ao nível da “árvore”. Na série de

trabalhos a que tenho aludido, temos de certo modo adoptado a primeira atitude. Desenvolvemos um modelo de potencial realista, com fundamento semi-teórico, para sistemas diatômicos, posteriormente generalizado a sistemas poliatômicos, embora, por razões de simplicidade, tenhamos concentrado a atenção em sistemas com até quatro átomos. Refira-se que para um sistema diatômico a função potencial é uma curva num espaço bidimensional, para um triatômico é já uma hipersuperfície num espaço a quatro dimensões – três das quais correspondem às separações interatômicas –, e para um tetraatômico precisamos já de um espaço a sete dimensões para representar a função potencial. Assim, se para dois átomos o problema é já complicado, o problema maior com sistemas tetraatômicos é que “têm dois átomos a mais”...

EFEITO DAS FORÇAS DE VAN DER WAALS

Química – A dimensão do espaço é a das combinações n dois a dois, $\binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$

A.V. – Certo. Portanto o método DMBE é geral, porque, em princípio, é aplicável a qualquer sistema, através de um desenvolvimento multicorpos duplo, envolvendo as energias Hartree-Fock generalizada e de correlação dinâmica, e tidas em conta as regras de correlação espacial e de spin do sistema em análise. Mesmo sem entrar em detalhes, é fácil perceber que as coisas se podem complicar bastante, mesmo para sistemas com poucos átomos. No entanto, temos aplicado com sucesso o método DMBE a sistemas com até quatro átomos, embora o número de sistemas tetraatômicos estudado seja ainda muito pequeno. O objectivo é, dentro da aproximação de Born-Oppenheimer, obter uma função potencial realista que permita descrever qualquer processo de colisão a ela sujeito, reactivo ou não. Por exemplo, com o potencial para o sistema O_4 , procurámos racionalizar não apenas a dinâmica e cinética da reacção $O + O_3 \rightarrow 2O_2$ mas também estimar o segundo coeficiente de virial do oxigénio molecular em fase gasosa. Naturalmente, os potenciais DMBE poderão tornar os estudos de dinâmica molecular mais dispendiosos do ponto

de vista computacional, dada a sua maior “complexidade”. Todavia, creio ser preferível investir horas de um Cray utilizando um potencial realista do que metade desse tempo num modelo a que falte realismo físico. Daí o uso que tem sido dado aos nossos potenciais pela comunidade científica.

Química – Como compara o computador que tem em Coimbra com o Cray?

A.V. – Refere-se certamente ao VAX 9000-210VP, acabado de instalar. Não fizemos “benchmarks” nesse sentido, embora julgue que um CRAY Y-MP tenha uma velocidade LINPACK cerca de dez vezes superior. Todavia, numa operação global custo/“performance”, e aproveitamento do “know-how” existente em Coimbra, parece-me ter sido uma boa escolha. Obviamente, estamos ainda longe dos melhores centros mundiais, mas esse não é o problema maior como creio ter já deixado ficar claro. A falta de dinâmica e massa crítica de investigadores, bem como o delinear de objectivos a atingir com uma utilização óptima dos recursos disponíveis, esses são outros problemas tão ou mais importantes.

Química – Para um químico, as reacções em solução são essenciais. Como vê a extensão dos seus trabalhos ou outros no sentido de incluir o solvente?

A.V. – É uma questão importante, mas cuja resposta não é fácil. Ao falar de reacções em solução parece que o objectivo é mais a “floresta” do que a “árvore”, na linguagem atrás utilizada. Mas admitamos que não. Bem, neste caso, e uma vez que não faria sentido procurar a função potencial para toda a fase condensada, talvez se pensasse em nos cingirmos às espécies em reacção e a uma, duas, ou mais moléculas do solvente. Do ponto de vista do químico teórico a supermolécula em estudo passaria então a ser constituída pela espécie intermediária da reacção propriamente dita, e pelas moléculas de solvente que decidissemos incluir. Obviamente que a dimensão do espaço configuracional aumentaria exponencialmente, levando a um acréscimo idêntico na dificuldade de resolução do problema

computacional. Mas, por vezes, mesmo em fases condensadas, hipóteses drásticas, com vista à simplificação do problema, revelam-se interessantes e produzem resultados quantitativamente correctos. Dou-lhe um exemplo. Em colaboração com um grupo da Universidade de Minneapolis, estudámos a cinética da reacção $H + H_2$ e isotopómeros, em fase gasosa, a temperaturas próximas do limiar do zero absoluto, utilizando teoria variacional do estado de transição. Um dos objectivos era observar o efeito das forças de van der Waals no controle da reactividade a baixas temperaturas, um outro era comparar os resultados calculados com medições experimentais obtidas em fase sólida. A concordância foi bastante satisfatória, o que leva a crer que o principal mecanismo de reactividade a tais temperaturas se deve ao efeito de túnel do átomo de hidrogénio através da barreira de potencial para a reacção de troca, *e. g.*, $D + H_2 \rightarrow DH + H$. Tal concordância pode explicar-se, em parte, também pela mobilidade da molécula de hidrogénio no retículo cristalino, quase se passando como se o efeito das moléculas de H_2 vizinhas se pudesse ignorar numa primeira aproximação.

ARGUMENTOS NÃO CIENTÍFICOS

Química – Foi co-autor com o Professor Formosinho do Modelo de Intersecção de Estados (M.I.E.). Quer falar-nos sobre esse modelo?

A.V. – É o exemplo típico de um caso em que se ignoram os detalhes “microscópicos” específicos de cada sistema com vista a poder ter uma perspectiva abrangente. Despiu-se a teoria da sua complexidade multidimensional, procurando-se uma “coordenada de reacção” efectiva que ligasse os reagentes aos produtos. Sem dúvida que se terão perdido detalhes importantes, mas esperamos que tenham subsistido os ingredientes determinantes da reactividade. Não entrarei em pormenores, pois creio que o M.I.E. é já minimamente conhecido. Embora tenha colaborado sobretudo nos aspectos formais do modelo, creio que o Professor Formosinho e seus colaboradores o têm desde então aplicado com sucesso a muitos sistemas de interesse em química,



embora, como o próprio me tem dito, a publicação dos resultados nem sempre tenha sido fácil. Curiosidades, algumas dos bastidores da Ciência... Efetivamente, quando se propõe uma determinada teoria, existindo outra bem sucedida, é difícil vencer a barreira inercial oferecida pela comunidade científica.

Química – Não há uma dificuldade maior *facto* dessas teorias provirem de países menos desenvolvidos cientificamente (o que em princípio não devia suceder)?

A.V. – Creio que sim, mas também esses Países não estão totalmente isentos de responsabilidade por falta de uma boa política científica, neste caso de “marketig”. A testemunhar a importância do local de origem, embora certamente o trabalho valha por si mesmo, está o *facto* do potencial DMBE para o sistema H_3 , calculado durante uma visita minha, em Julho de 1985, ao grupo do Professor Truhlar em Minneapolis, ter sido muito utilizado não obstante existirem na altura potenciais alternativos de boa qualidade para este sistema, um deles desenvolvido pelo grupo do Professor Truhlar e outro por mim próprio, ambos do final da década de 70. Isto para não falar do bem conhecido potencial de Porter e Karplus para o sistema H_3 , dos meados da década de 60, ainda hoje utilizado com alguma frequência. Todavia, em muitos casos, é possível encontrar uma explicação para a referida inércia da comunidade científica. Por exemplo, uma vez utilizado para testar uma dada teoria

dinâmica, o mesmo potencial será por via de regra utilizado para testar todas as outras teorias dinâmicas que vierem a surgir, pois só assim os respectivos méritos podem ser apreciados em pé de igualdade. O mesmo se passa em dinâmica molecular não reactiva, *e. g.*, o potencial de Lennard-Jones, dos anos 20, devido à sua simplicidade, ainda hoje é utilizado em estudos de simulação computacional, não obstante existirem potenciais muito mais realistas para a maioria dos sistemas de interesse químico. Existe, no entanto, um outro tipo de passividade bem mais preocupante, geralmente oriundo da comunidade científica do país de origem. É que, com tristeza, vejo, por vezes, o produto nacional ser preterido em benefício do estrangeiro. Se for por motivos de qualidade ou princípios científicos inteligíveis, não poderei deixar de concordar. Sou, todavia, totalmente fechado a argumentos não científicos. Enfim, precisamos de sentir algum “amor patriótico”, recordando uma conversa televisiva a que assisti numa noite destas, e de que, sinceramente, gostei muito...

Química – Está a aludir à posição defendida pelo Dr. Veiga Simão no debate televisivo sobre a Educação em Portugal em que se juntaram três ex-ministros da Educação e um deputado?...

A.V. – Exactamente. Concordo com o ponto de vista do Professor Veiga Simão, desde que devidamente interpretado. Assim, não me refiro a um patriotismo cego, não científico, mas a uma vontade permanente de querer mostrar que Portugal não é uma mera parcela da geografia mundial mas um povo que ainda hoje pode dar contributos à ciência mundial, merecedores de apreço, pese a nossa modesta dimensão. Se valermos agora pelo querer, talvez possamos um dia valer pelo poder... Assim nos sejam dados os meios para que tal se torne possível.

Química – Gostaria de acrescentar algo mais?

A.V. – Apenas o meu sincero agradecimento a todos os meus colaboradores, nacionais e estrangeiros. Só com a sua valiosa ajuda foi possível o que fizemos.