

QUÍMICA

Editorial	2
Noticiário SPQ	3
Química On-line	9
Livros & Multimédia	10
Atracção Química	11
Opinião	
De regresso aos Gregos? A crise das ciências tradicionais <i>José A. M. Simões</i>	12
Química e Ensino	
Colégio Luso-Francês, Porto <i>Carlos F. Simões</i>	14
O conceito de cientista em diferentes níveis de ensino <i>Ana M.S. Lima, Margarida R. Neves, Clara Cordeiro, Manuel Aureliano</i>	19
Artigos	
O Quadro de classificação periódica da sustentabilidade <i>Adélio A. S. C. Machado</i>	21
Análise Calorimétrica aplicada a polímeros biológicos <i>Maria Helena Casimiro, João P. Leal, M. Helena Gil, Carlos A. N. de Castro</i>	29
Haloperoxidasas de vanádio – enzimas muito versáteis <i>Filipe A. Natálio, Marisa Nicolai, Marise Almeida, Madalena Humanes</i>	37
Folhas de Química	
A água sabe a lixívia <i>M. Filomena Camões</i>	47
Actividades de Laboratório	
Pilha de combustível <i>Anabela Viegas, M. Clara Magalhães, M. Isabel Ferreira</i>	49
Actividades na sala de aula	52a
Tomar Nota	53
Agenda	56

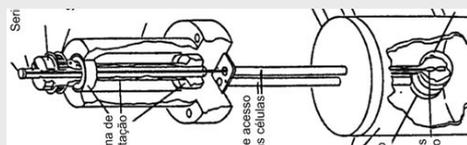
Colégio Luso-Francês do Porto 14

Desde o átrio de entrada que se respira uma atmosfera de muita tranquilidade, calma e organização. Estamos no Colégio Luso-Francês, localizado na cidade Invicta.



Análise Calorimétrica 29

O conhecimento aprofundado da estrutura das macromoléculas biológicas permite esclarecer as suas funções enquanto compostos intervenientes no processo metabólico dos seres vivos. A partir daqui abre-se o caminho para a concepção de novas moléculas modificadas com propriedades melhoradas para aplicação a nível industrial

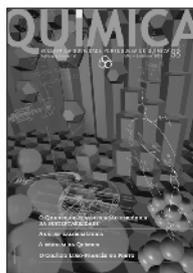


Pilha de Combustível 49

Há diversos aspectos relacionados com a electroquímica que se podem explorar, tais como: a constatação e entendimento da electrólise, nomeadamente as reacções de oxidação-redução; a cinética das reacções químicas; e questões de ácido-base e precipitação.



**Boletim da
SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA**



Capa de Nuno Gonçalves

Propriedade de:
Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870 – 1180
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 98, Julho – Setembro 2005

Redacção e Administração

Av. da República, 37 – 4.º
1050-187 LISBOA
Tel.: 217 934 637
Fax: 217 952 349
E-mail: boletim@fe.up.pt
www.spq.pt

Editor

Joaquim Faria

Editores-Adjuntos

Carlos Folhadela
Helder Gomes
Jorge Morgado
Marcela Segundo

Comissão Editorial

Hugh Burrows
Maria José Calhorda
J. Ferreira Gomes
Ana Lobo
Irene Montenegro
João Rocha
M. N. Berberan e Santos
A. Nunes dos Santos

Publicidade

Helder Gomes
Tel.: 273 303 112
Fax: 273 313 051
hlgomes@ipb.pt

Grafismo

sentido: designers / Nuno Gonçalves

Execução Gráfica

FACSIMILE,
Offset e Publicidade
Rua Vitor Bastos, 10-A
1070 – 285 LISBOA
Tel.: 213 829 792
Fax: 213 829 794
mail@facsimile.pt

Tiragem

2500 exemplares

Preço avulso

€ 12,50
Assinatura anual – quatro números
€ 45
(Continente, Açores e Madeira)
Distribuição Gratuita aos sócios da SPQ

As colaborações assinadas são da exclusiva responsabilidade dos seus autores, não vinculando de forma alguma a SPQ, nem a Direcção de "Química". São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas. A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração podem ser encontradas nas páginas interiores.

Publicação subsidiada pela

FACT Fundação para a Ciência e a Tecnologia
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E DA TECNOLOGIA

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



O trimestre Julho – Setembro acomoda simultaneamente o período de férias e um ciclo de transição escolar, emocionalmente intenso para a maioria das famílias. O início da vida escolar dos mais novos, a mudança entre níveis de ensino distintos e a passagem à vida profissional envolvem a tomada de algumas decisões, cujas implicações nem sempre são visíveis de imediato. À medida que a meta da educação se torna visível, a criatividade, a vocação e o gosto vão ganhando o seu lugar nestas decisões e em alguns casos a questão de se optar por uma carreira em química irá eventualmente colocar-se.

Hoje em dia, a questão pode levar a sentimentos opostos, quando se pesa o entusiasmo de uma carreira em ciência, face à imagem desenvolvida em torno da química e da indústria química nos últimos anos. Apesar da crise das ciências tradicionais (ver secção de Opinião) parece que os ventos mudança já sopram com alguma intensidade (ver nota sobre artigo de N.J. Moreau). Uma das missões da Sociedade Portuguesa de Química é contribuir para que a sociedade actual alargue o seu conhecimento sobre a química e os seus conceitos, abandonando definitivamente a ideia de ciência inatingível. O papel do cientista como o "homem da bata branca" que produz algo esotérico e impenetrável, cujos resultados oscilam entre verdadeiras bênçãos (v.g. medicamentos), ou pragas (v.g. poluição), tende a ser corrigido. Contudo, parece haver um longo caminho a percorrer.

Desde a sua fundação que a SPQ se constituiu como um centro de debate estimulante capaz de promover o contacto entre os seus membros e contribuir, por um lado, para o desenvolvimento da investigação em química e em engenharia química, e por outro, para um melhor ensino da química. Esses objectivos pressupõem uma adaptação aos tempos e um esforço renovado de modernização. Esse esforço está a ser traduzido com a criação do novo portal da SPQ, cuja atenção se chama no interior deste fascículo.

Porém convém não esquecer que a fundação da SPQ esteve intimamente ligada à publicação de uma revista (Revista de Química Pura e Aplicada) que sofreu várias mutações antes de ser extinta em 1997, como Revista Portuguesa de Química, por razões de envolvimento internacional nas revistas de grande prestígio da União Editorial das Sociedades de Química (*EUChemSoc*). Por isso, o *QUÍMICA* é actualmente a palavra impressa da SPQ. Não pode, nem pretende substituir a revista, pois possui forma e objectivos radicalmente distintos, mas representa para a maioria dos associados o benefício tangível da sua quota. É um dos locais privilegiados de troca de ideias dos sócios, onde cada contributo faz depender o sucesso de recolocar a química no seu lugar, na escola e na vida de todos os dias.

Joaquim Faria
boletim@fe.up.pt
www.spq.pt



A EuCheMS aplaude o lançamento da Plataforma Europeia sobre Alimento para a Vida

A Associação Europeia para as Ciências Químicas e Moleculares (EuCheMS), aplaude a implementação da Plataforma Europeia para acção sobre Alimento para a Vida – *The vision for 2020 and beyond*, lançada em Bruxelas, a 5 de Junho de 2005, pelo Comissário para a Investigação na EU Janez Potočnik.

Existe entre o público em geral uma consciencialização crescente de que a qualidade de vida pode ser melhorada à custa de uma alimentação mais saudável. Os consumidores buscam uma alimentação de elevada qualidade a preços convenientes, de fácil acesso e diversificada, e esperam cada vez mais que a produção alimentar seja mais eticamente cuidada e sustentada. A Plataforma Tecnológica Europeia (*European Technology Platform, ETP*) sobre Alimento para a Vida reunirá todas as partes interessadas na cadeia alimentar para assegurar que a escolha saudável é a escolha fácil, à custa de um programa de actividades integrado com objectivos claros destinado a promover e facilitar a inovação.

A indústria europeia de alimentos e bebidas teve lucros de 810 mil milhões de euros em 2004, transformou cerca de 70% da produção agrícola bruta e empregou 4,1 milhões de pessoas, a maioria em PME's um segmento crucial para o desenvolvimento nacional e regional, e para a criação de emprego. Investigação em ciências químicas terá uma contribuição valiosa em todos os níveis da cadeia alimentar ao facilitar o acesso a novos produtos alimentares, melhorados e inovadores que vão ao encontro das expectativas dos consumidores de amanhã.

O presidente da Divisão de Química Alimentar da EuCheMS, membro da RSC, Dr. Roger Fenwick, elemento do núcleo duro de desenvolvimento desta Plataforma, esclarece: *“A cadeia alimentar envolve químicos e química desde a produção até ao retalho, enquanto áreas emergentes de nutrição individual estão ligadas às ciências moleculares e analíticas. Assim, uma ETP bem sucedida nesta área proporcionará desafios enormes aos químicos na Europa, bem como promoverá oportunidades de carreira sustentáveis dentro do espaço europeu de C&T.*

Agora, o requisito fundamental é chegar a todas as regiões da Europa e a todos aqueles com um interesse profissional na cadeia alimentar, de modo a ganhar o seu apoio e garantir o seu envolvimento. Só deste modo a Alimentação para a Vida será verdadeiramente uma Plataforma Tecnológica Europeia”.



VI.ª Conferência de Química Inorgânica

Numa realização conjunta da **Sociedade Portuguesa de Química** e da **Universidade da Madeira/Centro de Química da Madeira** decorreu, no Funchal, entre 31 de Março e 2 de Abril de 2005, a **VI.ª Conferência de Química Inorgânica**. Esta Conferência, que se realizou pela primeira vez fora do seu espaço geográfico habitual, a Região da Bairrada, reuniu 110 participantes, a maioria dos quais jovens investigadores que tiveram a oportunidade de partilhar com todos os colegas os seus trabalhos de investigação mais recentes.

A Conferência contou com 8 lições convidadas dadas pelos Professores: Helena Garcia (FCUL), Vitor Félix (UA), Rui Reis (UM), Pedro Tavares (UNL) e Ana Margarida Martins (IST) e ainda pelos Professores Jean-Pierre Sauvage (Univ.

A Plataforma junta todas as partes interessadas, privadas e públicas, debaixo dos auspícios da Confederação das Indústrias de Alimentos e Bebidas da União Europeia, CIAA.

Esta plataforma é uma das seis incluídas no **Food Agriculture and Biotechnology ETP Cluster**.

O documento de base (*Vision Document*) pode ser consultado em **www.ciaa.be**. Comentários sobre o documento podem ser enviados para **jan.maata@unilever.com**, que também deve ser contactado por todos os que desejem participar no próximo nível de desenvolvimento da Plataforma – a definição de uma Agenda Estratégica de Investigação e um plano paralelo para a sua implementação. (Nota de imprensa, por via do Prof. José Empis, sócio n.º 1001, responsável na SPQ pelos assuntos ligados à EuCheMS)

JLF

Luis Pasteur), Nicholas Long (Imperial College) e Didier Astruc (Univ. de Bordéus). Durante o decorrer dos trabalhos foram apresentadas 16 comunicações orais, maioritariamente proferidas por estudantes de doutoramento e discutidos 64 trabalhos na forma de poster. Estiveram representados 10 países, destacando-se a presença do Professor Michael Fryzuk (Univ. of British Columbia – Canadá) e do Professor Laszlo Kollar (Univ. de Pécs – Hungria) que apresentaram, cada um deles, uma comunicação oral.

A Conferência, que teve como língua oficial o inglês a par do português, iniciou-se no dia 31 de Março, durante a manhã, com a chegada da maior parte dos participantes. Após o almoço, pelas 14 horas, deu-se início ao programa oficial, tendo a sessão de abertura contado com a presença do Magnífico Reitor da Universidade da Madeira (UMA), Profes-

sor Pedro Telhado Pereira que, no seu discurso de boas vindas, destacou a importância da realização da Conferência na Ilha da Madeira para a projecção nacional e internacional da Universidade mas também pela oportunidade que é dada aos estudantes da UMa de participarem num evento com estas características. Às 14h30 teve início a primeira lição plenária, proferida pelo Professor Jean-Pierre Sauvage, com o título “*From Chemical Topology to Molecular Machine Prototypes*”. O programa científico deste dia, que contou com 5 comunicações orais, foi encerrado pela Professora Maria Helena Garcia com a lição “*Organometallic Chemistry: a Nonlinear Point of View*”. Durante a tarde foram afixados os posters da Conferência e deu-se início ao primeiro dia de discussão dos trabalhos. Antes do *cocktail*, oferecido pela Secretaria Regional do Turismo e da Cultura, decorreu a **Reunião da Divisão de Química Inorgânica** onde foi apresentado e discutido informalmente, o relatório financeiro e de actividades da Conferência e eleito, por unanimidade, o próximo Presidente da Divisão de Química Inorgânica e organizador da Conferência da Divisão em 2007. O segundo dia de trabalhos iniciou-se pelas 9h30 com a lição plenária “*Studies of Molecular Recognition by Molecular Dynamics Methods*”, proferida pelo Professor Vítor Félix, a que se seguiram mais 3 lições plenárias proferidas pelos Professores Nicholas Long, Rui Reis e Pedro Tavares que encerrou o dia de trabalhos com a lição plenária “*Structural and Mechanistic Studies of Biologic Oxygen Activation*”. Durante este dia foram apresentadas 8 comunicações orais e concluída a discussão dos trabalhos apresentados na forma de poster. Este dia foi encerrado com uma prova de Vinhos da Madeira a que se seguiu o Jantar da Conferência onde foi anunciado, oficialmente, o nome do próximo Presidente da Divisão, a Professora Cristina Freire (UP). No último dia de trabalhos, que se iniciou pelas 9h30 com a lição plenária “*Azamacrocyclic-Based Group 4 Metal Complexes: Syntheses, Structure and Reactivity*” proferida pela Professora Ana Margarida Martins, foram

apresentadas 3 comunicações orais, tendo o Professor Didier Astruc encerrado o programa científico com a lição plenária “*Metallo-dendrimers and Gold Nanoparticles: Assembly, Sensing and Catalysis*”. A sessão de encerramento decorreu pelas 12h50 e contou com a presença do Professor Paulo Ribeiro-Claro que, em representação da Direcção da SPQ, destacou o apoio da SPQ à organização da conferência sob a forma de atribuição de bolsas de deslocação a alguns dos jovens investigadores participantes. Esteve também presente a organizadora da próxima Conferência, a Professora Cristina Freire, que agradeceu a confiança depositada pela Divisão, prometendo que durante o próximo ano serão fornecidas as primeiras informações sobre a Conferência que irá decorrer na zona habitual, a Bairrada. A seguir à cerimónia de encerramento decorreu um almoço, tendo os participantes aproveitado a tarde de sábado e boa parte do domingo para usufruir das condições oferecidas pelo Hotel da Conferência e para visitar a cidade do Funchal e a Ilha da Madeira.

Para além dos apoios institucionais (por exemplo da FCT, Universidade da Madeira, Secretaria Regional do Turismo e da Cultura, Instituto do Vinho da Madeira), a Conferência contou com o apoio financeiro de algumas das mais importantes e prestigiadas empresas portuguesas da área do fornecimento de material/equipamentos e reagentes, tendo também podido contar com o contributo de algumas empresas estrangeiras não representadas em Portugal (Oxford Diffraction e ScienTec).

A Comissão Organizadora Nacional agradece a todos: Direcção da SPQ, Universidade da Madeira, *sponsors*, convidados, participantes, alunos e colegas do Departamento de Química da UMa. O seu contributo foi decisivo para o sucesso científico, social e organizativo da **VI.ª Conferência da Divisão de Química Inorgânica**. À Professora Cristina Freire desejamos os maiores sucessos no desempenho das funções de Presidente da Divisão de Química Inorgânica.

Até 2007 na VII.ª Conferência da Divisão de Química Inorgânica.

Pela Comissão Organizadora Nacional,
João Rodrigues



Sessão de Encerramento Da esquerda para a direita, os colegas Cristina Freire (próximo Presidente da Divisão de Química Inorgânica), Paulo Ribeiro Claro (em representação da Direcção da SPQ) e João Rodrigues (Presidente em exercício da Divisão)

6.º Encontro Nacional de Química Orgânica (6.º ENQO)

O Grupo de Química Orgânica da Universidade do Minho, em colaboração com a Divisão de Química Orgânica da Sociedade Portuguesa de Química, organizou em 1995 o 1.º ENQO. Foi com enorme satisfação que, passados dez anos, teve oportunidade de voltar a organizar este evento, que decorreu nos dias 20, 21 e 22 de Julho em Braga.

Sete oradores proferiram lições plenárias: J. Mulzer, Áustria; J. Gasteiger, Alemanha; El Sayed El Ashry, Egipto; Nazario Martin, Jose Barluenga e J. Seijas, Espanha e Rui Fausto, Portugal. Houve ainda a contribuição de químicos orgânicos portugueses e espanhóis, quer da Universidade quer da Indústria (Hovione, CIN, Bial, CIPAN), com comunicações orais convidadas ou em painel, tendo-se procurado abranger um leque alargado de tópicos actuais e de grande interesse: produtos naturais, novos métodos de síntese, métodos computacionais em química orgânica, química de compostos heterocíclicos, compostos com aplicação biológica, nanomateriais, entre outros.

A participação de cerca de 200 investigadores, professores e estudantes permitiu um vivo debate sobre os temas

apresentados. Foi também um local privilegiado para o estabelecimento de contactos entre os grupos das várias universidades. A qualidade das contribuições e das discussões que se seguiram foi de nível elevado, na opinião dos participantes.

A Química Orgânica em Portugal continua a crescer, situando-se ao nível europeu, e está assim de parabéns.

Durante o Encontro teve lugar a Assembleia Geral da Divisão de Química Orgânica, tendo sido eleitos os membros da Direcção da Divisão de Química Orgânica da SPQ para o próximo biénio: Ana Maria Lobo (UNL), Presidente, Artur Silva (UA) e Teresa Pinho e Melo (UC), vice-Presidentes.



Momento da Sessão de Abertura e Boas Vindas Da esquerda para a direita: Prof. Doutor José da Costa Lima (Vice-Presidente da Sociedade Portuguesa de Química), Prof. Doutor António Guimarães Rodrigues (Reitor da Universidade do Minho) e Prof. Doutora Ana Maria Campos (Presidente da Comissão Organizadora do 6.º ENQO e Presidente cessante da Divisão de Química Orgânica)

CERC3 – Workshops para jovens químicos em 2006

Todos os anos o CERC3 (Chairmen of European Research Council's Chemistry Committees) organiza vários workshops abordando tópicos específicos. Estes workshops têm o objectivo de oferecer aos jovens investigadores dos países membros do CERC3, que ainda não sejam professores, a oportunidade de apresentar a sua linha de investigação a outros jovens cientistas. Adicionalmente, os workshops constituem uma oportunidade para o início de colaborações com outros parceiros Europeus. Com o objectivo de garantir um evento de elevado nível científico, os participantes nestes workshops são seleccionados pelos conselhos nacionais dos membros do CERC3.

No ano de 2006, irão realizar-se quatro "Young Chemists Workshops":

Microreactor Technology, na Holanda

Este workshop é dedicado à síntese realizada em equipamentos micrométricos. O termo síntese inclui não só reacções químicas, mas também o fabrico de emulsões e a produção de outras estruturas de dimensões micrométricas. Será dado ênfase não só a trabalhos ao nível

do projecto e produção, como também ao nível da operação, sendo objectivo do workshop fornecer uma perspectiva sobre as últimas tendências e indicações sobre quais as direcções que esta disciplina está a tomar.

Lanthanide-mediated Organic Reactions, na Bélgica

Este workshop é dedicado ao uso de sais de lantanídeos como reagente para reacções orgânicas em água. Alguns dos tópicos abordados incluem o uso de lantanídeos como catalisadores de reacções de Friedel-Crafts, reacções de oxidação promovidas pelo cério, compostos organolantanídeos como catalisadores de polimerização, lantanídeos em líquidos iónicos e solvente fluorados, catálise heterogénea por lantanídeos e lantanídeos em catálise micelar.

Chemistry for the Conservation of the Cultural Heritage, em Itália

Este workshop irá focar estudos analíticos sobre pinturas, esculturas e artefactos arqueológicos, técnicas de diagnóstico, pesquisa sobre novos materiais e métodos para a consolidação, protecção e limpeza de obras de arte. Os tópicos abordados incluem a identificação de pigmentos, a identificação de matéria

orgânica (tintas, lacas, ligantes, resíduos arqueológicos, ...), o desenvolvimento de técnicas não destrutivas e a exploração de técnicas analíticas não convencionais.

Organo Catalysis, na Suécia

A organocatálise é um tema renascido e em rápido desenvolvimento em química orgânica avançada. Recentemente, foram reportadas várias reacções apresentando elevada enantioselectividade, mediadas por organocatalisadores. Destacam-se reacções de formação das ligações C-C fortemente enantioselectivas, oxidações e trans-hidrogenações. Os mecanismos de activação destes organocatalisadores são similares aos das enzimas isentas de metal, encorajando os cientistas a desenvolver novas reacções inspiradas nas ocorridas em enzimas. A evolução molecular destes catalisadores aliada a estudos de modelação molecular, irá conduzir a novos e melhores organocatalisadores. Como consequência, é de esperar que novas e antes consideradas reacções impossíveis sejam descobertas.

Neste workshop pretende-se discutir amplamente as recentes descobertas na área da organocatálise e quais as

direcções de trabalho futuro mais promissoras.

Portugal irá participar em cada um destes workshops com dois jovens cientistas. Para encontrar mais detalhes, consultar o portal correspondente em www.cerc3.net/activities_ycw_in_progress.html.

Helder Gomes

A SPQ na imprensa diária

A pretexto de um caderno temático sobre a "Astronomia e as Ciências Espaciais" o QUÍMICA em entrevista ao jornal "O Primeiro de Janeiro" (edição de 07/08/2005) falou da ATRACÇÃO QUÍMICA e das iniciativas da SPQ para contrariar o crescente desinteresse dos jovens pela formação em áreas científicas, onde se

inclui a Química. A SPQ referiu entre as várias acções para inverter a tendência, as Olimpíadas de Química e como se têm revelado um mecanismo de divulgação bastante importante. Discutiu-se o papel da SPQ no seio das Associações Científicas Internacionais, bem como o papel particular da Química no domínio do aeroespacial.

JLF

Projectos editoriais de Química para 2005/2006

Neste número decidimos dar início a uma catalogação pontual dos manuais de Química aprovados para o ano lectivo de 2005/2006. De um modo geral, e de acordo com o Ministério da Educação, este ano serão objecto de nova adopção os manuais referentes aos 3.º, 6.º, 11.º e 12.º anos de escolaridade. No portal da Direcção-Geral de Inovação e de Desenvolvimento Curricular (DGIDC), encontram-se as orientações relativas à adopção de Manuais Escolares para o

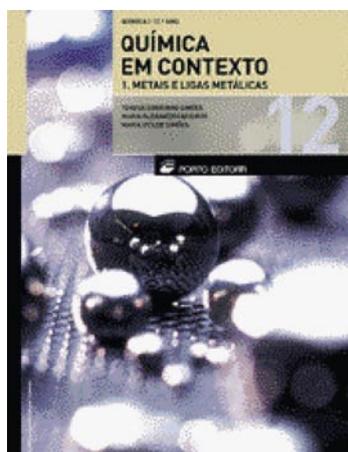
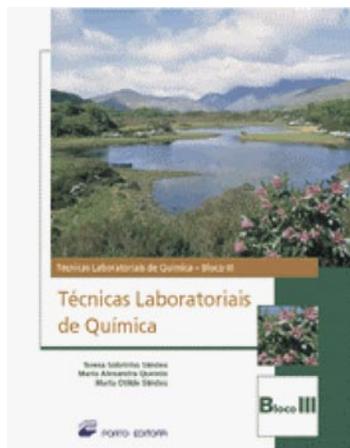
ano lectivo de 2005/2006 e seguinte, especificando os períodos e anos de escolaridade, critérios de apreciação dos manuais, tudo de acordo com a circular n.º 6/2005, de 14 de Abril da mesma DGIDC. É ainda tratada a questão da adopção *on-line* de Manuais, bem como são apresentadas as listas de manuais disponíveis em 2005/2006. Estas listas exaustivas (podem ser obtidas em formato PDF a partir de www.dgicd.min-edu.pt/public/manuais.asp) permitem identificar 30 títulos distribuídos por 6 editoras diferentes. Algumas delas seleccionaram os títulos disponíveis.

Porto Editora

"Técnicas laboratoriais de Química – Bloco III" (ISBN 972-0-42265-3), Autoras: Teresa Sobrinho Simões, Maria Alexandra Queirós e Maria Otilde Simões.

"Química em Contexto – 12.º" (ISBN 972-0-42217-3), Autoras: Teresa Sobrinho Simões, Maria Alexandra Queirós e Maria Otilde Simões.

"Eu e a Química" – 11.º ou 12.º (ano 2), (ISBN 972-0-42244-0) Autoras: Maria Manuela Gradim, Noémia Maciel e Maria José Campante.



Texto Editores

"12 Q" (ISBN 972-47-2791-2) Autores: Victor Gil, João Paiva, António José Ferreira e João Vale. Inclui CD-ROM de apoio ao professor.

"Jogo de Partículas 11.º Ano" (ISBN 972-47-2761-0) Autores: Maria da Conceição Dantas e Marta Duarte Ramalho.

CF/JLF





Programas científicos da European Science Foundation

Até ao dia 4 de Novembro de 2005, a European Science Foundation (ESF) aceita propostas para novos programas científicos nas seguintes áreas: Ciências Biomédicas, Física e Ciências de Engenharia, Humanidades, Ciências Sociais, Vida, Terra e Ambiente, sendo encorajadas propostas multidisciplinares abrangendo várias das áreas mencionadas.

Um programa científico da ESF consiste numa rede Europeia envolvendo grupos de investigação de vários países a desenvolver actividades de investigação financiadas durante quatro a cinco anos, abordando um tópico científico de elevada importância ao nível Europeu. Os principais objectivos do programa incluem a criação de uma rede interdisciplinar, a partilha de conhecimento e de experiências, o desenvolvimento de novas técnicas e o treino de jovens cientistas.

Uma proposta de programa com sucesso deve apresentar uma elevada qualidade científica e mostrar também uma mais valia em ser desenvolvido ao nível Europeu, em vez de em grupos de in-

vestigação individuais ao nível nacional. Pode incluir as seguintes actividades: encontros científicos (workshops, conferências e cursos) organizados pelos participantes do programa, bolsas de mobilidade para estadias curtas, publicação de folhetos informativos, livros científicos e actas de conferências, e elaboração de bases de dados ao nível Europeu.

Para obter informações mais detalhadas sobre a elegibilidade das propostas, o nível de financiamento, os critérios de avaliação e o processo de submissão, consultar o portal da organização em www.esf.org.

Helder Gomes

Olimpíadas de Química – vencedores absolutos de 2005

Com a realização da Final no dia 7 de Maio, no Departamento de Química da Universidade de Aveiro, terminou a edição de 2005 das Olimpíadas Portuguesas de Química. Os 27 alunos finalistas, apurados de entre um total de 309 participantes nas semifinais realizadas em Aveiro (DQ), Lisboa (IST) e Porto (DQ), realizaram uma prova teórica – este ano sob o tema “Einstein e a Química” – e uma prova prática laboratorial. A classi-

ficção na prova laboratorial foi decisiva para a atribuição da medalha de ouro.

As provas foram filmadas pela equipa de reportagem do programa 3810-UA (Canal 2:), que emitiu a peça correspondente nas primeiras horas do dia 11/05.

Vencedores:

Medalha de Ouro: Paulo Alcino Macedo (E.S. Castelo da Maia)

Medalha de Prata: Sofia Helena Ferreira (E.S. Augusto Gomes – Matosinhos)

Medalha de Bronze: David Morais Furtado (E.S. Dr. Manuel Fernandes – Abrantes)

Completam ainda a equipa que representará Portugal nas Olimpíadas Internacionais de Química e nas Olimpíadas Ibero-americanas de Química de 2006, os alunos, Ana Rita Garcia Nogueira (E.S. de D. Duarte – Coimbra), Raul Saraiva (E.S. Augusto Gomes – Matosinhos) e Li Paula Balkesáhl (E.S. António Nobre – Porto).

Paulo Ribeiro Claro

2 medalhas de bronze na Olimpíada Ibero-americana de Química 2005

Os estudantes portugueses Duarte Saraiva Martins, da ES Cacilhas-Tejo, e Bruno Macedo, da ES Rio Tinto, regressaram da X Olimpíada Ibero-Americana de Química, realizada em Lima, Peru, com duas Medalhas de Bronze. A equipa portuguesa ficou a um pequeno passo de regressar com 4 medalhas, incluindo a prata. Os problemas da organização local acabaram por ser decisivos: entre outros, um lapso da organização deixou os estudantes de língua portuguesa sem a tabela de fórmulas que acompanhava o exame teórico...

Na 37.^a Olimpíada Internacional de Química, realizada em Taiwan, Duarte Martins viu fugir-lhe por pouco a medalha de bronze, com a sua classificação final de 63% (o bronze foi atribuído a partir dos 64%). A fadiga originada pela enorme diferença de fusos horários e o insucesso das opções tomadas para a preparação prévia dos estudantes foram detalhes que fizeram a diferença e que teremos de corrigir no futuro.

Termina assim a participação portuguesa nas competições internacionais de 2005, com um saldo de duas medalhas de bronze, à imagem do que aconteceu em 2003. Embora este seja um resultado meritório, deixa algum “sabor

a pouco”, já que os nossos estudantes demonstraram claramente ter capacidade para obter resultados muito mais significativos.

Entretanto, as competições de 2006 já estão em marcha: a 38.^a edição da Olimpíada Internacional de Química decorrerá em Gyeongsan, Coreia do Sul, de 2 a 11 de Julho, enquanto a 11.^a edição da Olimpíada Ibero-Americana de Química será aqui bem mais perto, na Universidade de Aveiro, em Setembro.

Paulo Ribeiro Claro

A imagem da indústria química na Europa melhora em 2004, revela a IUPAC

Pela primeira vez nos últimos 12 anos, a imagem pública da indústria química ao nível europeu apresenta uma variação positiva, contrariando a anterior tendência de declínio.

Este facto é revelado no número de Julho-Agosto do boletim da IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), num artigo dedicado à Conferência "The Public Images of Chemistry in the 20th Century/As Imagens Públicas da Química no Século 20", que decorreu em Paris (17-18 de Setembro de 2004).

Nesta Conferência foram analisadas as imagens e as mensagens que o público

recebe acerca da química, através de uma grande variedade de meios: literatura, publicidade, notícias, cinema, banda desenhada e exposições.

A visão negativa da química parece ter origem em arquétipos sociais. O cinema e a literatura reflectem frequentemente o Químico como um cientista louco, muitas vezes maldoso e quase sempre perigoso. Os acidentes industriais passam uma imagem negativa da química para o público, e poucos são os europeus que associam a Química ao seu conforto no dia a dia.

Mais preocupantes são as indicações de que a forma de ensinar química nas escolas pode contribuir para a ansiedade ou para o medo da química.

No entanto, os esforços desenvolvidos para levar um maior conhecimento da Química aos cidadãos europeus – nomeadamente através de programas de divulgação científica – parece estar a resultar. Após anos de declínio, a imagem da Química junto da opinião pública europeia melhorou em 2004. E a posição de popularidade da indústria química num conjunto de 8 actividades industriais melhorou da 7.^a para a 6.^a posição. A tabela é liderada pela indústria de telecomunicações e encerra com a indústria nuclear.

O texto completo de Nicole J. Moreau pode ser consultado na página da IUPAC (<http://www.iupac.org>).

Paulo Ribeiro Claro

Conferência internacional sobre Positrão e Positronio

No Departamento de Física da Universidade de Coimbra realizou-se, de 4 a 9 de Setembro, a "8th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry", PPC-8 que contou com a presença de 90 participantes de 27 pa-

íses, incluindo Estados Unidos, Rússia, China, Japão, Suécia, Alemanha, Reino Unido e Brasil.

O programa da Workshop incluiu os diferentes aspectos físicos e químicos, fundamentais e aplicados, do comportamento do positronio e do positronio em materiais sólidos (metais, semiconduto-

res e dieléctricos), líquidos e gasosos. Polímeros e nano-materiais mereceram também particular atenção. Um Simpósio sobre aplicações médicas dos positronios, com especial incidência em PET, foi também incluído na Workshop.

Hugh Burrows

Actualidades Científicas

Novos materiais porosos com capacidade de armazenamento de acetileno

Cientistas japoneses sintetizaram um material organometálico microporoso contendo cobre, que armazena selectivamente grandes quantidades de acetileno em competição com dióxido de carbono à temperatura e pressão ambiente (*Nature (2005) 436, 238*). O acetileno, matéria-prima para a síntese de muitos produtos químicos, é muito reactivo e explode à temperatura ambiente, mesmo na ausência de oxigénio, quando comprimido a pressões superiores a 2 atm. O material desenvolvido permite armazenar acetileno com uma densidade 200 vezes superior à conse-

guida no limite de compressão do gás à temperatura ambiente.

O material sintetizado, $\text{Cu}_2(\text{pzdc})_2(\text{pyz})$, sendo pzdc: pirazina-2,3-dicarboxilato e pyz: pirazina, tem canais permanentes unidimensionais, com secções rectas de dimensões nanométricas. A adsorção selectiva do C_2H_2 em competição com o CO_2 nunca foi conseguida com adsorventes convencionais, como os zeólitos e os carvões activados.

Utilizando uma técnica conhecida como o método da máxima entropia, baseada em dados de difracção de raios-X, os cientistas japoneses procuraram determinar o mecanismo de adsorção do C_2H_2 no material organometálico e elucidar a estrutura cristalina global e a densidade electrónica do complexo contendo C_2H_2 .

Concluíram que as ligações por pontes de hidrogénio entre os átomos de hidrogénio ácidos das moléculas de C_2H_2 e dois átomos de oxigénio básico não coordenados do material microporoso, facilitam a adsorção selectiva. Por outro lado, a molécula de CO_2 , embora similar em estrutura e dimensões à molécula de C_2H_2 , não tem protões ácidos.

O grupo japonês pretende agora sintetizar materiais organometálicos microporosos para armazenar outras moléculas, incluindo os óxidos de azoto (NO_x) e de enxofre (SO_x), que poluem o ambiente e as moléculas de metano e hidrogénio, importantes de um ponto de vista energético. (adaptado de *Chemical & Engineering News (2005) 83 (29), 7*)

Helder Gomes

www.spq.pt

A face da SPQ disponível na Internet foi recentemente renovada com o objectivo de servir melhor os nossos associados.

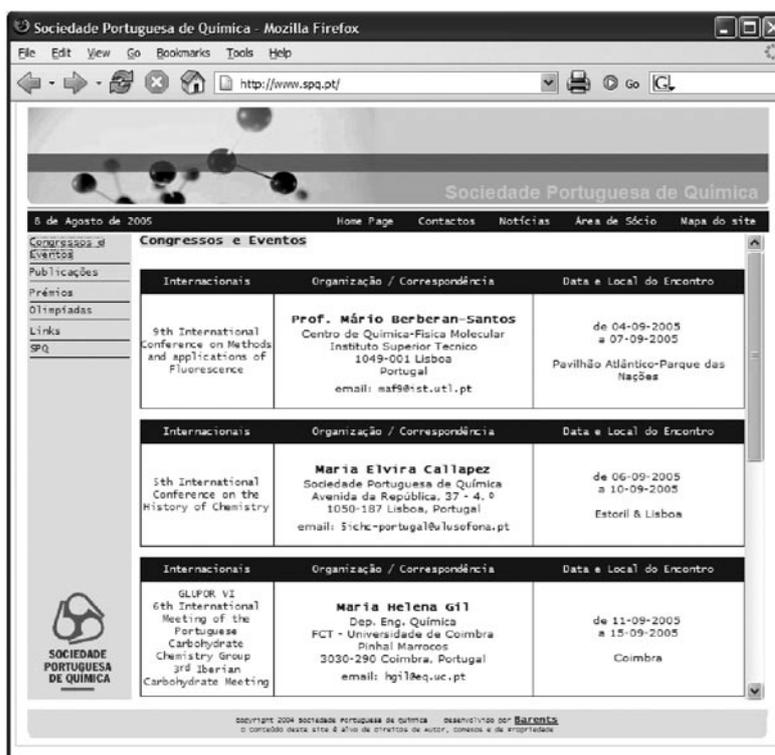
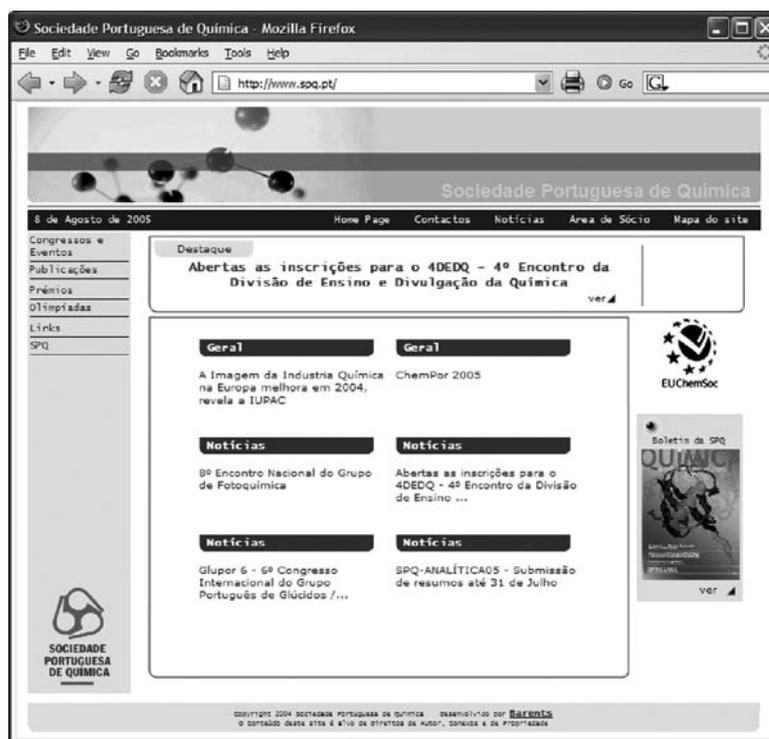
Assim, é de destacar a nova área de sócio. Nesta área pode-se, por exemplo, proceder à alteração dos dados pessoais, consultar informações institucionais e aceder a produtos exclusivos dos nossos associados.

Outra área em expansão é a referente ao Boletim da SPQ. Neste caso, todas as edições, passadas e presentes, estarão disponíveis em formato digital. Será ainda possível pesquisar a base de dados de boletins de forma fácil e exaustiva (por exemplo por autor, data, assunto, tipo de artigo e qualquer palavra ou palavra-chave que seja utilizada num artigo).

Os congressos também mereceram atenção particular. Criou-se uma interface de gestão de congressos que possibilita a todos os organizadores uma gestão facilitada dos recursos financeiros e inscrições. Num futuro próximo estarão disponíveis mais módulos, dos quais gostaríamos de salientar o de elaboração automatizada do livro de resumos.

Na sua totalidade prevê-se que este projecto esteja completo em Março de 2006. Esperamos que as novas funcionalidades sejam do agrado de todos, mas mesmo assim gostaríamos que este texto suscitasse questões e sugestões para que a interacção entre os sócios e a SPQ seja cada vez melhor e mais fácil.

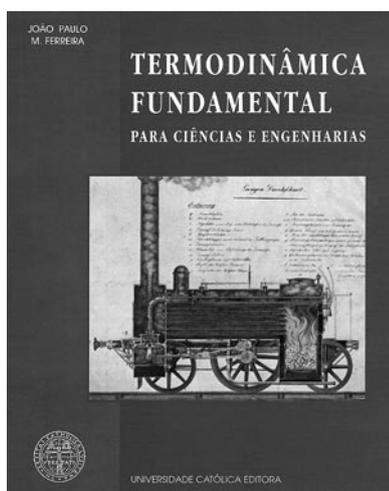
Pedro Tavares



Termodinâmica Fundamental para Ciências e Engenharias

por João Paulo M. Ferreira, Universidade Católica Editora, 2003,
292 págs. €22,00. ISBN 972-54-0047-X

MARIA EUGÉNIA REBELLO DE ALMEIDA MACEDO*



“Desde há alguns anos, lecciono uma disciplina de Termodinâmica, nível básico, simultaneamente para alunos de engenharia e de ciências biológicas. Os conteúdos programáticos e os métodos didácticos têm assim de se adaptar a diferentes objetivos. (...)”

Para primeiro curso parece-me fundamental privilegiar a compreensão física ou visão mecanicista dos fenómenos, sem a qual toda a aprendizagem posterior ficará comprometida. Não obstante a simplicidade houve preocupação em manter o rigor e a correcção formal das análises.”

(do prefácio)

“Termodinâmica Fundamental para Ciências e Engenharias” é um texto de introdução à termodinâmica, escrito em língua portuguesa, com muita qualidade e em que são versados assuntos relevantes neste tema, reconhecidamente fundamental em todas as tecnologias.

O livro, que tem uma índole essencialmente pedagógica, apresenta os conceitos fundamentais e as várias matérias de forma clara, numa linguagem simples, mas sem perder o elevado rigor científico que se impõe, e recorrendo sempre que possível a exemplos, alguns ligados ao quotidiano, o que revela um enorme cuidado com vista a uma melhor compreensão física dos fenómenos.

Apresenta um capítulo inicial em que o autor faz uma breve nota histórica da Termodinâmica, onde se podem encontrar os nomes dos cientistas que ficaram

ligados aos conceitos base e à evolução da Termodinâmica, com alusão às respectivas contribuições. Constitui, certamente, um factor de incentivo para os estudantes que estão a iniciar os estudos neste tema.

A este capítulo seguem-se os restantes onze, onde são introduzidos os conceitos fundamentais desta ciência, e seguidamente são estudadas as diferentes formas de energia e suas trocas, os Primeiro e Segundo Princípios da Termodinâmica e Entropia. Existem ainda capítulos dedicados ao estudo de equilíbrio de fases, propriedades termodinâmicas para sistemas em equilíbrio, equilíbrio com reacções químicas, Terceira Lei da Termodinâmica, comportamento de gases reais e também balanços em sistemas abertos. Os capítulos são, geralmente, curtos e bastante específicos

da matéria aí abordada, com exemplos de aplicação para maior facilidade de aprendizagem. No final de cada um, existe uma lista de problemas propostos para resolução.

De salientar que, como o próprio autor também esclarece no prefácio, este é um texto de introdução à Termodinâmica clássica, não abrangendo todos os assuntos relevantes em diferentes licenciaturas. De facto, na licenciatura em Engenharia Química, por exemplo, este texto poderá ser usado numa fase inicial, devendo ser obrigatoriamente acompanhado por outros livros ou manuais em que as propriedades termodinâmicas e os equilíbrios de fases e reaccionais de misturas sejam contemplados com a profundidade requerida para a formação nesta área.

* Professora Associada c/ Agregação de Termodinâmica Química do Departamento de Engenharia Química, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Atracção Química

PAULO RIBEIRO CLARO*

Passadas as iniciativas mais emblemáticas da “Atracção Química” deste ano – as Olimpíadas de Química Júnior e o 4.º Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da

Química (este a poucos dias de diferença da publicação deste número do “Química”) – é tempo de voltar a dar atenção à Química na Internet.

Já foi escrito nesta coluna que a importância da *Internet* como fonte de informação para os mais jovens não pode ser ignorada, estando a SPQ apostada em promover o aumento da quantidade e da qualidade da informação existente em português na área da Química. De facto, a ausência de filtros que garantam a qualidade da informação obtida na *Internet* é um problema que pode ser parcialmente ultrapassado pela criação de um número elevado de páginas, em “sítios” fidedignos: a partir daí, os próprios critérios dos motores de busca mais utilizados conduzem naturalmente à selecção preferencial da *boa informação*.

Esta é, sem qualquer dúvida, uma missão a que não podem ficar alheias as instituições universitárias, e os Departamentos de Química (em sentido lato, ou seja, incluindo também os de Engenharia Química e de Bioquímica, por exemplo) têm todo o interesse em criar páginas de Química especificamente dirigidas aos interesses dos jovens dos 10 aos 17 anos.

Quem já visitou as páginas dos Departamentos sabe que é fácil encontrar informação institucional (órgãos dirigentes, quadro de docentes, contactos, cursos leccionados,...) mas é mais difícil encontrar conteúdos e concepções gráfi-

cas destinados aos jovens estudantes pré-universitários. A SPQ continua a desenvolver esforços para promover o aparecimento de textos de divulgação científica, textos de apoio para professores e alunos de química, normas de segurança em laboratório, novidades e curiosidades da química, história da química, etc., nestas páginas departamentais. Um esforço que promete começar a dar frutos... que serão objecto de atenção futura nesta secção.

Neste contexto, merece referência especial o projecto “Química.em.linha” [<http://www.itqb.unl.pt/~ccr/quimicaemlinha/Index.html>]. Um projecto independente e ambicioso, a que Carlos C. Romão tem dedicado muitas horas de entusiasmo pessoal (e que tem, obviamente, o apoio da SPQ). Ainda em fase embrionária, o portal Química.em.linha – que pretende ser o portal português com “*tudo o que você quer saber sobre a Química... e não sabia onde encontrar*” – poderia ganhar muito com os contributos das páginas departamentais. A partilha de conteúdos traria aos Departamentos uma visibilidade acrescida e permitiria garantir a *sustentabilidade* de um projecto meritório.

Mas se é verdade que faltam na *Internet* os conteúdos que satisfaçam (e estimulem) a curiosidade dos jovens pela Quí-

mica, também é certo que a informação institucional que normalmente se encontra nas páginas departamentais é útil e deve ser cuidada: pode influenciar a escolha dos alunos na hora da candidatura ao ensino superior!

De facto, um inquérito informal efectuada aos alunos do primeiro ano do curso de Engenharia Química da Universidade de Aveiro (J. Coutinho, 2005) mostrou que a *Internet* é a fonte principal de informação para os jovens candidatos ao ensino superior. Perante a pergunta de opção “Consultou informação sobre o curso para se candidatar? (Sim/Não)”, apenas 39 alunos, num total de 57, responderam positivamente. No entanto, perante a pergunta de resposta livre “Em caso afirmativo onde obteve essa informação?”, 27 alunos em 36 responderam “na *Internet*!” A “Escola Secundária” e os “Folhetos” da própria Universidade tiveram apenas 4 respostas cada. Ou seja, 70% dos alunos que procuraram informação sobre o curso da sua preferência obtiveram-na através da *Internet* e apenas 20% utilizaram as fontes mais convencionais (folhetos e informação na Escola Secundária, que surgem assim como um investimento pouco rentável). A amostra pode não ser representativa, mas, ainda assim, é mais um indício claro da justeza das primeiras linhas deste texto.

*Coordenador das Olimpíadas de Química e Secretário-Geral Adjunto da SPQ (pclaro@dq.ua.pt)

De regresso aos Gregos?

A crise das ciências tradicionais

JOSÉ ARTUR MARTINHO SIMÕES*

Muitos dos que falam em “sociedade do conhecimento”, em “sociedade da informação”, na necessidade de investir em ciência e tecnologia, ignoram que algumas áreas científicas tradicionais, com uma enorme quota parte de responsabilidade pelo nosso *modus vivendi*, estão claramente fora de moda. É o caso da Química e da Física (só para mencionar as ciências ditas “duras”), o que se reflecte, por exemplo, na escassez de candidatos ao ensino superior nestas áreas. Na Química (e é aqui que centrarei a minha atenção) são reconhecidas algumas causas da crise. A própria palavra “química” tem uma percepção negativa pela opinião pública, devido aos problemas de saúde e de ambiente originados por algumas substâncias. Estas questões têm estimulado medidas legislativas que, frequentemente, afectam negativamente a actividade e a competitividade das indústrias químicas e afins.

A chamada crise da Química poderá conduzir a um deficit na qualidade e na quantidade dos seus praticantes, o que terá seguramente um grande impacto económico e social no espaço europeu. Basta recordar que a indústria química europeia, um dos segmentos mais competitivos a nível mundial e responsável por milhões de postos de trabalho, se deslocaliza cada vez mais para o espaço asiático.

Mas a crise da Química é mais profunda e, curiosamente, assenta no seu próprio sucesso. Num recente editorial do *Chemical & Engineering News*, o ma-

gazine da *American Chemical Society*, argumentou-se que a palavra “química” se tornou inadequada para reflectir a importância e a latitude desta ciência. O editorialista foi mais longe: propôs que o nome *American Chemical Society* (a maior sociedade científica do mundo, com cerca de 160.000 membros) fosse substituída por *Society for Molecular Sciences & Engineering*. Como seria de esperar, a proposta desencadeou reacções inflamadas.

Existe, de facto, um problema de identificação da Química. Os seus praticantes vangloriam-se que a sua ciência é “central”, ou seja que os conceitos, modelos e metodologias que aplicam são relevantes ou mesmo indispensáveis em praticamente todas as esferas do conhecimento científico e tecnológico. Aceite-se ou não esta afirmação, o problema é que foi precisamente a transversalidade da Química que levou a que outras ciências tenham pouco a pouco absorvido e interiorizado o conhecimento químico que vão necessitando. Para o comprovar, basta consultar projectos, livros, artigos, ou mesmo notícias nos média, em áreas como Biotecnologia, Materiais, Nanotecnologia, Ambiente, Ciências da Terra e do Espaço, Ciências do Mar e Ciências da Saúde (isto para não falar em outros neologismos que surgiram mais de necessidades de marketing que para designar áreas verdadeiramente novas). Mais: as chamadas “ciências moles”, como a Biologia e a Geologia, tornam-se cada vez mais duras, ao incorporarem conhecimentos da Química e da Física. A palavra “mo-

lecular” tornou-se essencial para emprestar modernidade a algumas áreas (exemplo: medicina molecular) e o prefixo “bio” tornou-se quase obrigatório para atrair jovens (engenharia biológica, bioinformática, biomateriais). Quando se juntam os dois, é ouro sobre azul (microbiologia molecular).

A forte tendência para a interdisciplinariedade da Ciência não é, em si, um mal. Antes pelo contrário: estimula colaborações e alarga os horizontes dos cientistas, alimentando-os de ideias que provavelmente nunca lhes teriam ocorrido, e permite abordar e resolver problemas complexos através do trabalho em equipa de especialistas de várias áreas científicas. Por outras palavras, a resolução de uma questão interdisciplinar exige frequentemente uma equipa multidisciplinar. Por exemplo, enfrentar uma questão ambiental complexa pode exigir uma colaboração estreita entre especialistas de várias áreas (geólogos, biólogos, químicos, etc.).

Discutir a distinção entre “interdisciplinar” e “multidisciplinar” não é um exercício estéril porque nos permite definir estratégias sobre a qualificação de recursos humanos. Fará sentido falar de um “especialista” num tema interdisciplinar? Teoricamente sim, mas é muito difícil encontrar uma pessoa que seja especialista em diferentes áreas científicas. O facto de a ciência ser cada vez mais interdisciplinar não significa que devemos apostar numa formação científica generalista, de onde resultam produtos (as pessoas!) que sabem

* Prof. Catedrático, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Campo Grande, 1749-016 LISBOA, Portugal, jams@fc.ul.pt

pouco sobre muitas coisas. A interdisciplinaridade de muitos temas da ciência moderna nada tem a ver com o sincretismo do conhecimento grego ou medieval. A prática da ciência e da tecnologia continuará a exigir excelente formação e

investigação nas áreas científicas tradicionais, cada uma com a sua “cultura” própria.

A crise da Química e da Física e a aposta em formação interdisciplinar a nível da licenciatura terão um custo que inevita-

velmente iremos ter de pagar. Ninguém se lembra do trabalho dos químicos quando avia uma receita médica, quando abastece o automóvel com gasolina, ou quando barra o pão com manteiga.

Actualidades Científicas

Dopagem de Nanocristais

Uma das razões pelas quais os materiais semicondutores são abundantemente utilizados na electrónica moderna, deve-se ao facto de poderem ser dopados com impurezas como o fósforo, que alteram a sua condutividade e outras propriedades eléctricas de uma forma controlada. Com o rápido desenvolvimento da área da nanoelectrónica, a possibilidade de extensão dos métodos de dopagem dos materiais semicondutores aos nanocristais semicondutores, afigura-se muito promissora. No entanto, os nanocristais semicondutores, apesar dos progressos conseguidos na prossecução do objectivo, têm revelado uma tendência refractária à inclusão de impurezas na sua composição.

Recentemente, uma equipa de cientistas da Universidade de Minnesota desenvolveram um modelo teórico baseado em parâmetros fundamentais e usaram-no como guia na preparação de nanocristais de CdSe dopados com Mn, um material até a data considerado não ser possível dopar (*Nature* (2005) 436, 91).

Os investigadores explicam que, ao contrário da dopagem de cristais macroscópicos, que é regulada pela termodinâmica, a dopagem à nanoescala é regulada principalmente pela cinética. Se uma impureza atómica conseguir ligar-se fortemente à superfície e permanecer assim por um tempo suficientemente longo, eventualmente esse átomo pode ser incorporado no nanocristal durante o seu crescimento. De acordo com o modelo, a força de ligação regula o processo de dopagem e depende principalmente da morfologia da superfície

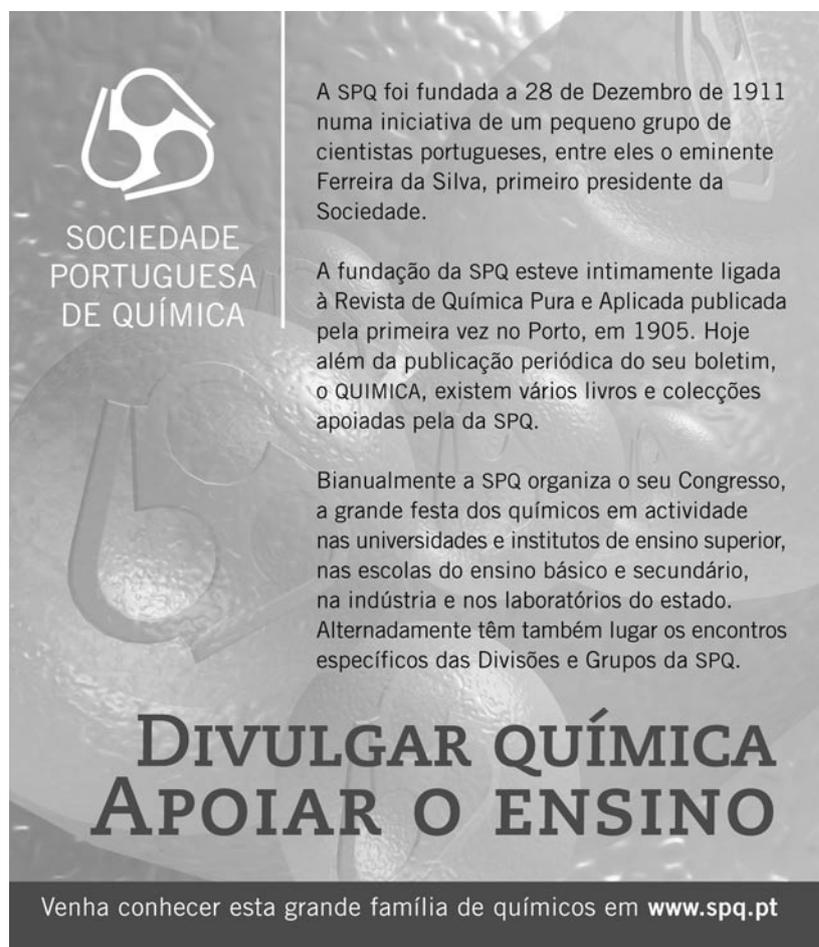
do cristal, do tamanho e natureza das faces do cristal, e das propriedades dos surfactantes usados na síntese.

No trabalho desenvolvido, os cientistas prepararam e analisaram uma variedade de nanocristais dopados. Descobriram que a concentração de Mn que pode ser incluído em ZnSe em função do tamanho do cristal e da forma, está de acordo com as previsões do modelo. Adicionalmente, usaram procedimentos de síntese adequados à preparação de cristais de CdSe com a estrutura previs-

ta pelo modelo como sendo mais fácil de dopar e demonstraram depois que o CdSe pode mesmo ser dopado com Mn.

Esta descoberta pode permitir que as propriedades dos nanocristais sejam aproveitadas em numerosas aplicações da engenharia, desde as células solares, aos futuros dispositivos de memória à nanoescala. (adaptado de *Chemical & Engineering News* (2005) 83 (28), 9)

Helder Gomes



SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

A SPQ foi fundada a 28 de Dezembro de 1911 numa iniciativa de um pequeno grupo de cientistas portugueses, entre eles o eminente Ferreira da Silva, primeiro presidente da Sociedade.

A fundação da SPQ esteve intimamente ligada à Revista de Química Pura e Aplicada publicada pela primeira vez no Porto, em 1905. Hoje além da publicação periódica do seu boletim, o QUÍMICA, existem vários livros e colecções apoiadas pela da SPQ.

Bianualmente a SPQ organiza o seu Congresso, a grande festa dos químicos em actividade nas universidades e institutos de ensino superior, nas escolas do ensino básico e secundário, na indústria e nos laboratórios do estado. Alternadamente têm também lugar os encontros específicos das Divisões e Grupos da SPQ.

DIVULGAR QUÍMICA APOIAR O ENSINO

Venha conhecer esta grande família de químicos em www.spq.pt

Colégio Luso-Francês, Porto

ENTREVISTA CONDUZIDA POR CARLOS FOLHADELA SIMÕES

Desde o átrio de entrada que se respira uma atmosfera de muita tranquilidade, calma e organização. Estamos no Colégio Luso-Francês, localizado na cidade Invicta. Fomos gentilmente recebidos pela Madre Superiora que desempenha ainda as funções de Directora Peda-

gógica, Irmã Helena Moreira. Acompanharam-nos na entrevista a Dr.^a Noémia Almeida, professora do 12.º ano e o Dr. Carlos Azevedo, Coordenador do Departamento de Ciências Exactas, da Natureza e Tecnologias.

Irmã Helena Moreira, agradecia que nos apresentasse o Colégio Luso-Francês que superiormente dirige...

Irmã Helena Moreira (HM) – O Colégio é uma Escola confessional, católica, pertencente à Província Portuguesa das Franciscanas Missionárias de Nossa Senhora. Está localizado na rua do Amial, freguesia de Paranhos, da cidade do Porto. Tem cerca de 1220 alunos distribuídos pelos diferentes níveis de ensino, desde o pré-primário ao secundário. Contamos com cerca de 85 docentes e 16 professores/monitores das activi-

dades complementares e extra-curriculares....

Que são...

HM – Variadas: viola, judo, natação, ténis, ballet, entre outras. Contamos ainda com cerca de seis dezenas de funcionários que se distribuem pelas diversas áreas. Duas psicólogas e duas enfermeiras em serviço rotativo constituem o restante quadro de pessoal não docente.

As instalações são suficientes para dar resposta a esse número de alunos?

HM – Tanto não são que estamos em fase de ampliação e construção de novos espaços. No entanto, os três edifícios que constituem as actuais instalações do Colégio têm-nos permitido exercer o nosso trabalho. Temos, para além das salas de aula, laboratórios, salas de informática, salas de música, sala multimédia, cantina, bar, piscina, pavilhões gimno-desportivos, salas de atendimento, gabinetes, sala de convívio dos alunos, sala de professores, gabinete médico, auditório, gabinetes de psicologia, papelaria, reprografia, capela, campos de jogos, espaços interiores e exteriores



“Desde o átrio de entrada que se respira uma atmosfera de muita tranquilidade, calma e organização. Estamos no Colégio Luso-Francês, localizado na cidade Invicta”.



A Madre Superiora e Directora Pedagógica, Irmã Helena Moreira, a Dr.ª Noémia Almeida, professora do 12.º ano e o Dr. Carlos Azevedo, Coordenador do Departamento de Ciências Exactas, da Natureza e Tecnológicas (da esquerda para a direita).

para recreio com parque infantil, sala de espectáculos e secretaria.

O que denota grandes investimentos para equipar todos esses espaços...

HM – Assim é. Todas as salas de aula estão devidamente equipadas com material adequado ao respectivo nível de escolaridade.

Quais são as grandes linhas do vosso projecto Educativo?

HM – A escola é, antes de tudo, um espaço privilegiado e vocacionado para o desenvolvimento e formação integral da pessoa humana. Quando se deixa a Escola, leva-se não só a aquisição de conhecimentos, mas também o ensaio que esta proporcionou para a inserção na sociedade nas suas diferentes dimensões. Nesta perspectiva o Colégio Luso-Francês, como escola católica, com ideário e características próprias, procura orientar o seu processo educativo para os seguintes objectivos gerais: educação para o crescimento espiritual e para os desenvolvimentos intelectual, afectivo, social e das expressões.

Das expressões? Qual o significado desse objectivo?

HM – A escola não só tem competência, como tem também obrigação de desenvolver todas as dimensões expressivas dos alunos, devendo fazê-lo de forma sistemática e coordenada tendo em consideração cada nível educativo.

Nesse sentido propomo-nos desenvolver as expressões artísticas: música, dança, teatro e a plástica; as expressões oral e escrita e o gosto pela leitura; a expressão motora e o gosto pelas actividades desportivas, as expressões tecnológica e audiovisual.

Li no átrio de entrada uma placa da APELF – Associação de Pais do Colégio – que dizia “ Não basta ter começado, é preciso continuar”. Gostaria que comentasse...

HM – Essa frase é da autoria de uma Superiora Geral logo, do início da Congregação. Entretanto, os pais entenderam que seria uma frase perfeitamente aplicável à situação, à realidade do Colégio. O Colégio apareceu em 1936, foi crescendo e, agora, realmente a frase surge como uma interpelação: não basta ter começado, é preciso continuar. Daí realmente o Colégio empenhar-se em cada ano em oferecer novas perspectivas e, como já afirmei, procurar fazer melhorias nas instalações, a nível de professores e alunos, motivar. Cumpre-nos dar continuidade a uma acção cada vez mais forte, mais vigorosa, que se imponha, não perante outros porque não temos esse objectivo, mas precisamente para formar jovens que se preparam para uma faculdade e para depois entrar no mundo, na sociedade, com fortes convicções, com saberes bem consolidados, virados para a investigação, para que possam dar um bom

contributo para a construção de uma sociedade cada vez melhor.

Considera então muito feliz a iniciativa dos pais. Poderei daí inferir que considera a APELF de primordial importância neste Colégio? Cultiva-se a chamada dos pais à Escola e à participação neste projecto?

HM – Sem dúvida. A Associação está muito atenta, muito receptiva, muito colaborante às necessidades e às actividades do Colégio. É um parceiro nesta caminhada da Educação aqui no Colégio Luso-Francês a quem damos muita importância. Aliás, estamos neste momento com a revisão do Regulamento Interno e foram chamados a dar o seu parecer e a prestar a sua colaboração.

Carlos Azevedo (CA) – Aliás, se me é permitido, ainda este ano os pais proporcionaram uma actividade que considero extremamente interessante: disponibilizaram-se para que os nossos alunos pudessem ter contacto com o dia-a-dia das suas profissões, o que creio mesmo, levou alguns a decidirem por outras opções.

Como Directora Pedagógica, o que sentiu quando, de um momento para o outro, o seu Colégio passou a “andar na boca do Mundo” e a Irmã apareceu, se me permite, quase como “estrela” televisiva...

...risos generalizados...

E por duas ordens de razão: por um lado, o 1.º lugar obtido no ranking divulgado pelo Ministério e por outro pelas longas filas às portas do colégio na tentativa de se obter uma inscrição para frequentar o Luso-Francês.

HM – Bem...muito honestamente fujo bastante disso. Para além de sermos assediados pelos canais televisivos e pela imprensa escrita, concedemos espaço a alguns, a outros conseguimos...digamos...fugir. É que o nosso lema é trabalhar. Nunca estimulamos os alunos, nem falamos em termos de *ranking*. Apercebemo-nos que eles o vão assumindo, de tal modo que após o teste de matemática (1.ª fase), uma aluna, que é uma daquelas alunas de “vintes”, pensando que não iria ter o vinte e se ficaria pelo dezanove me disse: – “Oh Irmã, vai ser este ano que vamos deitar o Colégio abaixo”...

...gargalhada geral...

Portanto, eles têm isso em atenção mas nós não. Não gostamos nada do vedetismo, de chamar à atenção, nem de nos colocarmos à frente seja de que jeito ou razão for. O objectivo é mesmo trabalhar, é darmos o máximo em favor destes jovens...

...os resultados vêm perfeitamente por acréscimo...

HM – ...Sim, pelo trabalho que os professores realizam e também pela motivação deles...

No ano transacto o Colégio obteve óptimos resultados a Química. Há alguma receita especial?

Noémia Almeida (NA) – Não, não há nenhuma receita. Esses resultados devem-

se à massa que encontramos; alunos com hábitos de trabalho e educação, o que é importante. Cumpridores. Tenho termo de comparação já que também lecciono no ensino oficial. As minhas aulas são exactamente as mesmas mas lá não tenho resultados tão bons.

Mas isso normalmente está associado a objectivos...

CA – Sim, os alunos aqui têm-nos bem definidos. Aqui traduz-se na entrada numa determinada Faculdade e lutam por isso. Enquanto nalgumas circunstâncias um 18 para alguns é motivo de alegria, aqui muitas vezes é de frustração.

...ainda faltam dois...

CA – Sim, mas para além disso querem compreender as coisas...

NA – ...cada um quer ser melhor...

CA – Têm gosto pelo que fazem, fazem exercícios até à exaustão, com gosto...

Essa vontade, o de fazer muito e bem, é-lhes incutida desde o 7.º ano...

NA – Muito mais cedo, desde os 3 anos de idade. Estava num festa de final de ano e tinha alunos que me diziam: “...Professora, eu não sei frequentar outra escola, estou cá desde os 3 anos... Como é que vai ser?...”

Mas a Físico-Química que se inicia no 7.º ano tem um trabalho coordenado que os motive para a Química e para que comecem logo com alicerces sólidos...

CA – Sim, pois aliados aos hábitos de trabalho que vão sendo desenvolvidos desde pequeninos, eles habituem-se a

saber estudar, a ter o seu tempo, a organizar as actividades em função dos estudos. No caso da Físico-Química, especificamente, no 7.º ano apostamos muito, apesar da carga horária não facilitar a vidas aos professores, na experimentação. Para eles a Química é uma festa de cores, de cheiros, de fumos...atrai-os imediatamente. Eles ficam rendidos...

...É mágica...

NA – Aqui tenho de fazer a crítica ao fim das técnicas laboratoriais...

CA – Sim, embora depois a parte teórica não os entusiasme tanto. Mas se começarmos aqui a levar as coisas a bom porto, eles no secundário já encaram a Química com gosto. Procuramos levar a ciência aos mais novos.

O 2.º lugar nacional nos resultados de Química teve, com certeza, reflexos positivos...

CA – Claro, deixaram-nos a todos satisfeitos. Além de que, para surpresa nossa, a Hovione, empresa da indústria química ligada à indústria farmacêutica, sediada em Loures, reconhecida pela FDA e com fábricas e sucursais em vários países, premiou-nos com uma visita às suas instalações e com material de laboratório.

...interessante essa atitude...

CA – Sim, de facto ao premiar as 5 escolas com os melhores resultados nacionais e apoiar da mesma forma as escolas do concelho de Loures é um serviço à comunidade que me parece interessante e estimulante.





“...criar novas instalações para oferecer espaços mais actualizados, como sejam os laboratórios”.

Que opiniões têm sobre a forma como está organizada curricularmente a Físico-Química no ensino básico?

CA – É evidente que o tempo é escasso. Aqui não desdobramos as turmas pelo que temos de ser criativos e imaginativos para podermos executar trabalhos práticos. A dificuldade de espaço físico, aliado ao tempo lectivo disponível, torna a situação complicada. Mas gostamos de pôr os miúdos a mexer nos tubos de ensaio, nos gobelés embora seja, como referi, difícil. Esperamos por novas instalações.

A Dr.ª Noémia referia-se há pouco ao fim das técnicas...

CA – Este ano leccionei o 10.º ano pela segunda vez, com o novo programa, agora já com a estrutura curricular adequada, com um bloco desdobrado para actividades laboratoriais. Acho que foi um bom complemento. Vamos ver como corre o próximo 11.º.

Mas os alunos que não vão ao laboratório no básico...

CA – Aí sim, poderemos ter sérias dificuldades para cumprir o que está no programa. O tempo para ensinar pela primeira vez a fazer relatórios, trabalhar dados, fazer gráficos... tornará tudo mais difícil. Seguramente o tempo não chegará.

Têm participado em projectos?

CA – Participamos no Nónio.

E no Ciência Viva? Consideram que devia regressar?

NA – Creio que sim. Foi uma experiência interessante e faz falta às escolas.

E nas Olimpíadas de Química?

CA – Aí sim. Participamos nas dos mais velhos e nas Olimpíadas Júnior. Não era costume mas temos aumentado a participação. Nas de Física é que temos um aluno seleccionado para nos representar no estrangeiro.

Que perspectivas para o próximo ano?

CA – Gostava de deixar um alerta para o que se possa vir a passar no próximo 11.º ano. Nas hipotéticas questões de exame já divulgadas, levantam-se algumas questões que talvez não tenham sido, por muitos, abordadas da melhor forma. Aqui vamos fazer esse reajustamento.

NA – Pelo que vi há perguntas que não avaliam conhecimentos.

E sobre o 12.º ano, algum comentário?

NA – Tenho grande receio do que pode vir a acontecer à Química. Prevejo que quer a Química quer a Física fiquem muito reduzidas. Por facilitismo, os alunos não optarão por uma disciplina que lhes dá trabalho e sobre a qual não terão que prestar provas. Vão ser disciplinas a evitar. Optarão por disciplinas mais fáceis que possam dar menos trabalho.

Isso, reflectir-se-á , a jusante, nas Faculdades...

NA – Sim. Se já agora os professores se queixam, imagine no momento em que os alunos ingressarem com menos horas de Química. Vão ter mais razões de queixa.

Estes programas são menos exigentes?

NA – Claro, como o programa é em mero contexto não é preciso aprofundar muito. É tudo pela rama. Isto terá consequências... Não estou muito de acordo com esta orientação. Nem dos programas nem da própria reforma que está a entrar no ensino secundário.

Os exames de 12.º ano merecem-lhe algum comentário?

NA – Permita que conteste algumas questões da maneira como foram colocadas mas essencialmente os critérios de correcção: facilitam erros e penalizam em 100% pormenores mínimos... e erros científicos graves não são penalizados porque o objectivo da questão não era saber isso. O Dr. Carlos Corrêa também já fez alguns comentários interessantes...

Mas voltando um pouco atrás, será esta dinâmica um dos factores que terá motivado aquelas filas à porta do Colégio...

HM –...sinceramente, aquilo incomodou-nos imenso. Achamos que foi um certo exagero. No entanto, poderá mostrar quais são os objectivos que presidem à escolha de um estabelecimento de ensino por parte dos Encarregados

de Educação. Vão atrás de miragens... Foi muito bem classificado, então vamos para ali. Imaginemos que este ano não ficamos numa posição tão cimeira. Isso vai traduzir que descemos em qualidade? Estou segura que não. Tudo isso depende dos objectivos dos alunos. No ano anterior tínhamos um grande grupo que queria medicina. Este ano, o grupo para as engenharias é maior. Não precisam de médias tão altas. Os alunos ainda são novos e não percebem que a nota, para além de traduzir uma possibilidade de entrar na Faculdade desejada, pode e deve também ser espelho de saberes bem consolidados que lhes poderá conferir uma maior segurança no seu percurso universitário. A escolha do estabelecimento deveria ser feita em função do projecto, do ideário, da qualidade.

Para evitar essas fileiras, na revisão do Regulamento Interno do Colégio, estamos a redefinir os critérios de admissão e as modalidades de fazer a pré-inscrição.

Mas é difícil vir estudar para o Colégio Luso-Francês?

HM – Só pelo facto de não existirem vagas. É evidente que os *rankings* vieram acentuar aquele mito que o Colégio Luso-Francês...

Tem acesso directo à Faculdade...

...risos....

Como Directora Pedagógica considera que existem diferenças acentuadas na forma de trabalhar no ensino privado e no público?

HM – Sim. Tenho consciência que no ensino público também há muitos bons professores e escolas que se procuram organizar e que funcionam razoavelmente. Nós talvez tenhamos vantagem pela estabilidade do corpo docente. Há um maior acompanhamento dos alunos ao longo dos ciclos. Isso pode criar uma relação afectiva, um estímulo e uma motivação superiores. Depois, o próprio professor conhece o aluno em termos de capacidades. Assim sendo, há aquela exigência: "Tu és capaz de dar mais!", aumenta a motivação. No ensino público poderá faltar esse acompanhamento. Temos também na maioria dos

casos alunos motivados, com objectivos bem definidos. Isso faz com que tenham motivação para o trabalho, adiram a propostas e se empenhem...

NA – ...Mas isso é o Colégio que faz. A maior parte deles estão aqui desde os três anos de idade e o Colégio motiva-os...

...todas as multi-actividades proporcionadas desde a pré-primária contribuem para essa forma de estar quando mais velhos...?

NA – Claramente. Trabalho também no ensino público e a massa que encontro em ambos os lados não tem nada a ver. Vêm motivados, bem formados, com hábitos de trabalho e de estudo que os outros não trazem. E isso é o próprio Colégio que faz.

HM – Há um acompanhamento e uma exigência desde a base. Temos ainda uma grande ajuda do gabinete de psicologia. As duas psicólogas ajudam mesmo na ligação com as próprias famílias, na detecção de dificuldades na aprendizagem... são um apoio fundamental. As conversas que mantêm com os Professores também são importantes: dificuldades em família...

NA – ...Dificuldades pessoais...

HM – ...Tudo isso faz com que os alivie de uma carga emocional, afectiva que muitas vezes trazem. Essas cargas afectam-nos numa disponibilidade interior para concentração e atenção.

As medidas anunciadas pelo Ministério sobre a presença dos professores na escola seriam desnecessárias no Luso-Francês?

HM – Certo...tenho consciência que os professores não medem o tempo que dão à Escola. Naturalmente, têm a sua vida profissional que se pode estender para além do Colégio, têm os seus compromissos familiares, mas na realidade sinto que, se eles pressentem que a Escola deles necessita, os professores não medem o tempo que cá passam. Temos ótimos colaboradores.

Mas a Irmã tem consciência que isto está tudo muito bem organizado. No átrio respira-se tranquilidade e verifi-

ca-se a existência de muita informação disponível e organizada...

HM – ...procuramos...procuramos...

Poder-se-ia dizer que aqui se trabalha para a excelência para se fazer sempre mais e melhor...

HM – Certo. Realmente trabalhamos nesse sentido sem pensar no reconhecimento exterior mas ficamos satisfeitas quando é reconhecido. Há quinze dias regressi do Uruguai com um professor do Colégio pois fomos premiados pelo Conselho Ibero-Americano da Excelência Educativa. Foi algo com que nunca contamos. Foi a primeira vez que Portugal foi distinguido e para além de nós esteve o Colégio dos Carvalhos, a Universidade Fernando Pessoa, a Universidade do Vale do Sousa e um Instituto Profissional de Lisboa. Fomos os cinco distinguidos.

Estão em processo de certificação?

HM – Estamos a trabalhar para isso. A empresa que trabalha connosco não tem sido tão diligente quanto desejaríamos. Mas pessoalmente não vejo grandes vantagens nisso. Continua no entanto de pé a intenção.

Não tem sido algo que nos preocupe em demasia.

Três objectivos para o futuro...

HM – Continuar a dar o melhor ao nível dos nossos jovens, adolescentes e crianças. Trabalhar com esta equipa de professores que é jovem, dedicada e efectiva. São membros do Colégio, são companheiros de viagem; criar novas instalações para oferecer espaços mais actualizados, como sejam os laboratórios; criar mais intercâmbio com o estrangeiro para lhes oferecer o contacto e experiências com um mundo, que julgo, mais aberto do que o nosso.

Três palavras para definir o Colégio...

HM – Labor, Caritas, Fides. Trabalho apaixonado, o amor que sempre presidiu à causa e a fé que poderemos ligar a Jesus Cristo, mas também uma fé na vida, uma esperança de que estamos a construir jovens para trabalharem e construir uma sociedade melhor.

O conceito de cientista em diferentes níveis de ensino

ANA M.S. LIMA¹, MARGARIDA R. NEVES¹, CLARA CORDEIRO², MANUEL AURELIANO^{2*}

O ensino das ciências experimentais envolve um grande empenho, além de um consumo de tempo elevado, da parte dos professores para promover e induzir uma aprendizagem dinâmica de diversos conceitos científicos. Neste trabalho, é analisado o conceito de cientista no ensino básico e universitário. O presente estudo, relativo ao ano lectivo 2004/05, envolveu cerca de 600 alunos do ensino básico, desde o 5.º ao 9.º ano, com idades compreendidas entre os 10 e os 15 anos, das Escolas E.B. 2,3 D. Afonso

III, Faro; E.B. 2,3 António Contreiras, Armação de Pêra e E.B. 2,3 Sto. António (n.º 4), Faro. Foram ainda abrangidos neste estudo cerca de 100 alunos do 1.º e 2.º anos das licenciaturas em Bioquímica, Engenharia do Ambiente e Oceanografia da Universidade do Algarve. Aos alunos foram colocadas duas questões, tendo sido definido um tempo máximo de 25 minutos para a primeira e de 15 minutos para a segunda: 1) *Faça um desenho de um cientista*; e, 2) *O que é para ti um cientista?*

Os resultados obtidos para os alunos do 2.º e 3.º ciclos, foram comparados com os obtidos com alunos do ensino universitário. Este estudo, iniciado em 1999, recolheu até à data cerca de 2000 respostas, tendo sido analisados vários parâmetros tais como: vidraria, equações, computadores, telescópios entre outros. Os resultados demonstram que a imagem de um cientista continua estereotipada: um cientista se não é um louco, é um homem de bata com um

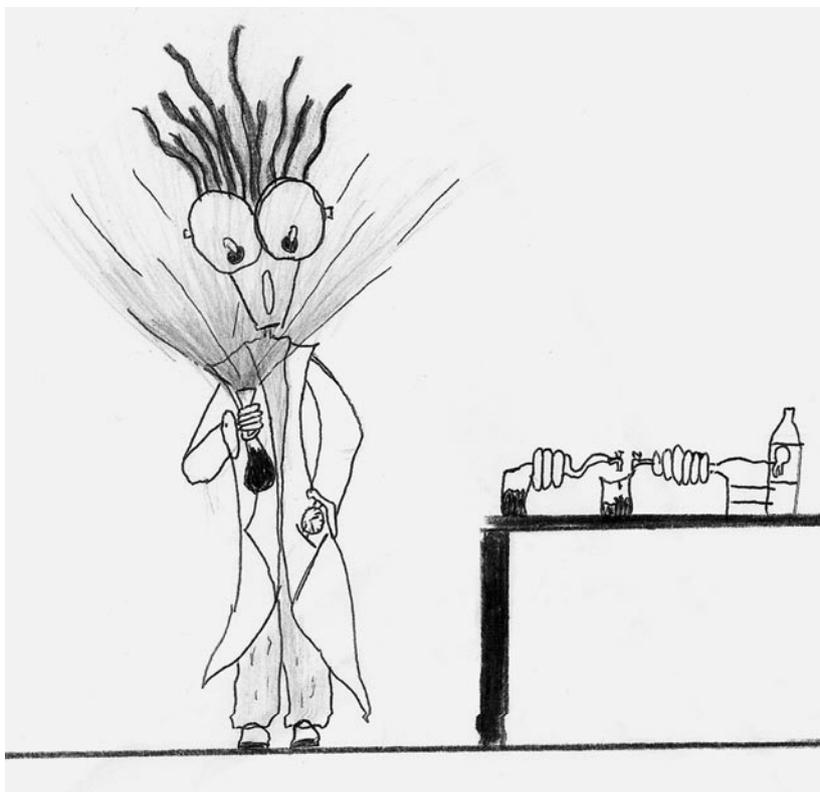


Figura 1 O conceito de cientista para um aluno do ensino básico: “Um homem de bata com um tubo de ensaio na mão, eventualmente um químico” (adaptada de um desenho realizado por um aluno do 2.º ciclo da Escola E.B. 2,3 D. Afonso III, de Faro).

¹ Escola E.B. 2,3 D. Afonso III, Faro; ² FCT, Universidade do Algarve, Faro

*autor correspondente: (maalves@ualg.pt)

"Conceito de cientista" no ensino básico e universitário

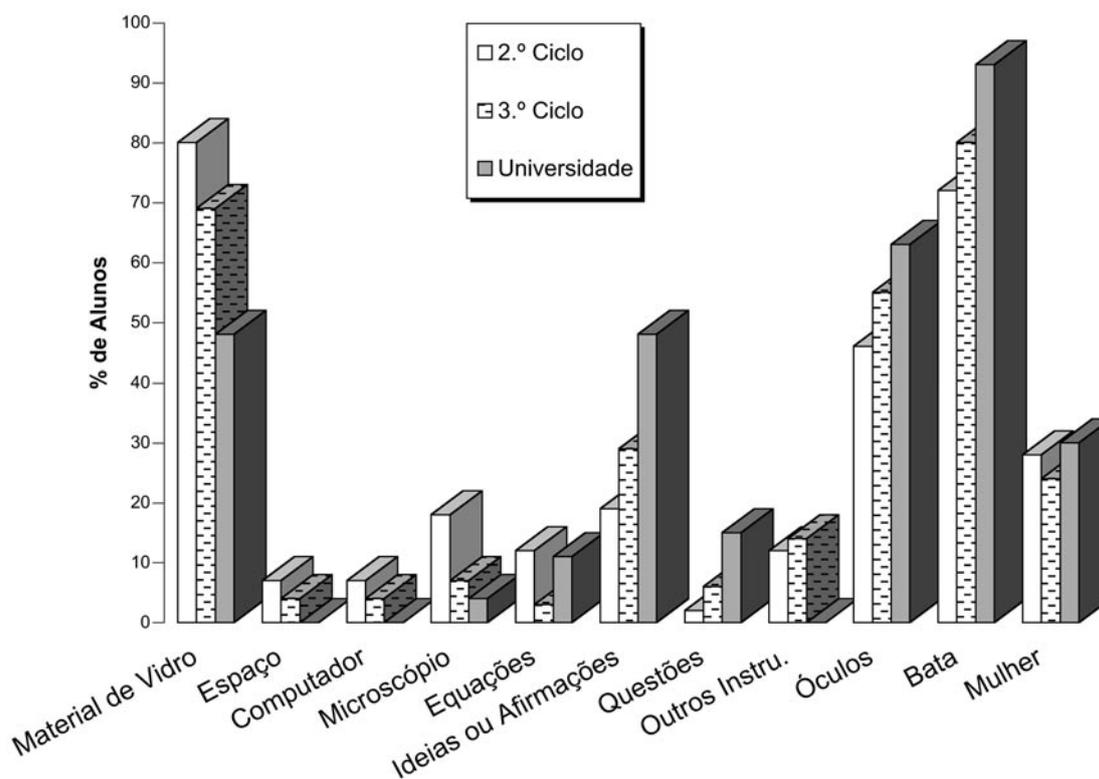


Figura 2 Representação gráfica de alguns parâmetros encontrados nos desenhos realizados pelos alunos do ensino básico (2.º e 3.º ciclos) e universitário.

tubo de ensaio na mão, eventualmente um químico (Fig. 1).

Além disso, verifica-se que de um modo geral o conceito de um cientista não se altera nos diferentes níveis de ensino em análise. Imagens de espaço e microscópios são mais comuns nos alunos do 2.º ciclo, isto é, desenharam o que estudam. Por outro lado, a imagem de uma mulher e a imagem de um computador normalmente não são associadas a um cientista (Fig. 2).

É comum, para os alunos do ensino básico, definir um cientista como sendo: “um inventor”; “aquele que faz experiências”; “uma pessoa com um gosto

enorme para descobrir” ou “um homem que fez uma descoberta muito importante”. Aparentemente, determinados conceitos devem ser transmitidos a alunos muitos novos ou com uma mentalidade aberta. Supostamente, a mente pode ser comparada a um pára-quadras: só funciona se estiver aberto. Nesse sentido, estes estudos contribuem para o desenvolvimento de estratégias que permitam a transmissão de determinados conceitos tangíveis e reais de uma forma dinâmica.

Embora não seja possível determinar se as actividades desenvolvidas neste projecto possam contribuir de algum modo para o desenvolvimento ulterior dos alu-

nos, promovem e estimulam diversas interações entre alunos e professores de diferentes níveis de ensino. Este estudo irá prolongar-se durante o presente ano de 2005, por diversas escolas do ensino básico e secundário da região Algarvia com o objectivo de analisar o conceito de cientista em vários níveis de ensino que serão comparados com estudos semelhantes já realizados e a realizar na Universidade do Algarve.

Os resultados obtidos no presente estudo serão posteriormente analisados no âmbito de uma colaboração com “The National Science Foundation”, dos Estados Unidos da América.



4º DEDQ

Encontro nacional da divisão de ensino e divulgação da química

Inscrições em oficinas e curso satélite em <http://www.spq.pt/congressos/4dedq/oficinas.asp>

O Quadro de classificação periódica da sustentabilidade

Uma metáfora para a química verde e ecologia industrial

ADÉLIO A. S. C. MACHADO*

Resumo:

Apresenta-se uma metáfora gráfica sobre o Quadro de Classificação Periódica (QCP) que consiste em adicionar-lhe três ingredientes a ter em conta quando se pratica presentemente a Química Industrial tendo em vista o Desenvolvimento Sustentável: a Energia, a Economia e o Ambiente – estes "elementos" metafóricos pervagam a

química do mundo real, sendo a sua consideração sempre fundamental para a implementação da Sustentabilidade (são "super-elementos"). Por isso, a sua inclusão no metafórico QCP da Sustentabilidade permite que os químicos os tenham sempre presentes, a par dos elementos materiais, para atender às suas consequências quando realizam reacções químicas à escala industrial.

Science is necessary, but not sufficient, in establishing one's view of the world.
Schroedinger, *British Journal for the Philosophy of Science*, 3 (1952) 109

A metáfora (análise e compreensão de uma situação a partir das suas semelhanças com outra mais bem conhecida) é muito importante para o desenvolvimento das ideias científicas sobre factos e conceitos novos, sendo usada, por exemplo, para ilustrar como os modelos se comportam com respeito às teorias científicas [1]. Recentemente, o químico inorgânico T. L. Brown discutiu a utilização da metáfora numa diversidade de campos da Química e Bioquímica, demonstrando a sua importância nos avanços de conhecimento em domínios tão diversos como a estrutura atómica, a bioquímica celular, a dobragem de proteínas, o aquecimento global, etc. [2]. No ensino da química, as metáforas são muito eficazes e utilizadas para apresentar matérias abstractas e pouco familiares com base no conhecimento e experiência anterior dos alunos sobre outras matérias já dominadas e o próprio mundo real [3-9]. Para este fim, têm-se usado quer metáforas linguísticas [3,6,7], quer metáforas gráficas [8], quer metáforas conceptuais [2,4,9], estas últimas muito adequadas na formulação de

modelos para a interpretação do comportamento dos sistemas microscópicos (átomos e moléculas) [2,4]. Na abordagem dos sistemas complexos que constituem o mundo real, a metáfora é também muito útil para a construção de modelos simplificados, tendo por isso larga aplicação, por exemplo, quer em ciências ambientais, quer na Ecologia Industrial para implementação da Química Verde [10]. O próprio conceito de Ecologia Industrial tem por fundamento uma metáfora com base na ecologia biológica [11,12] e usa outras metáforas, por exemplo, a de metabolismo industrial [13].

Este artigo tem como objectivo a apresentação de uma metáfora construída a partir do Quadro de Classificação Periódica (QCP) que conduz à expansão do mesmo com elementos adicionais, metafóricos, para vincar a importância da consideração da *energia*, da *economia* e do *ambiente* na procura do Desenvolvimento Sustentável ou Sustentabilidade. A ideia base da metáfora é que, numa altura em que a Química deve ser praticada tendo em vista uma

mudança da trajectória de avanço da Civilização Industrial para esta entrar na rota da Sustentabilidade, se impõe o uso de um novo QCP metafórico que, além dos elementos materiais, inclua os ingredientes adicionais que os químicos têm de integrar rotineiramente na sua actividade para contribuir para aquela mudança – para isso se introduz o *QCP da Sustentabilidade*. Esta metáfora gráfica tem vindo a ser usada com êxito como introdução a uma série de aulas sobre Química Verde e Ecologia Industrial integradas na cadeira de Química Industrial da Licenciatura em Química deste Departamento (Faculdade de Ciências da Universidade do Porto).

Os novos "elementos" – os super-elementos

Os elementos químicos, que constituem o QCP, são as unidades básicas que os químicos académicos que trabalham no laboratório (e que praticam a *Química Académica* ou *Química Laboratorial*) usam para construir novas moléculas – isto é, para preparar novos compostos,

* LAQUIPAI, Departamento de Química, Faculdade de Ciências, R. do Campo Alegre 687, 4169-007 PORTO (amachado@fc.up.pt)

que normalmente sintetizam, em pequena escala, a partir de outros compostos (e não directamente a partir apenas de elementos isolados). Os elementos químicos são também os constituintes básicos do mundo material que constitui o ambiente – a sua existência e modos de ocorrência neste são objecto de estudo em *Química Ambiental*. Por outro lado, o modo como os elementos e os compostos que os integram são manipulados em larga escala pela *Química Industrial*, que fabrica os produtos químicos, e por outras actividades que usam estes produtos para os mais variados fins, tem como consequência a dispersão e deposição no ambiente de substâncias diversas, nem sempre inócuas – poluentes e resíduos. Também estes problemas são objecto de estudo pela *Química Ambiental*.

Os químicos industriais, quando fabricam compostos em larga escala, na Indústria Química, que realiza a Química Industrial, usam, além dos elementos químicos e em paralelo com estes, outros ingredientes não materiais. Para evidenciar a sua importância, esses ingredientes podem ser metaforicamente designados como “elementos”. O papel destes outros “elementos” na Química Industrial é tão ou mais importante que a dos elementos materiais; e como tais “elementos” intervêm conjuntamente com estes e supletivamente a eles, podem ser adequadamente designados por *super-elementos* ou *pan-elementos*. Embora sejam quase sempre ignorados ou subalternizados na Química Laboratorial, os super-elementos, dada a sua importância e omnipresença no mundo real, condicionam completamente, ou quase, a implementação da Química Industrial – determinam os compostos que se fabricam/não fabricam com os elementos materiais do QCP, a via por que se fabricam, quando se fabricam, etc. Além disso, o modo como os super-elementos são manipulados (em conjunto!) tem enorme importância sobre os efeitos na ecossfera da Química Industrial e de muitas das outras actividades, praticadas pelas modernas sociedades industrializadas emergentes da Revolução Industrial, que utilizam produtos químicos. Por isso, os super-elementos

têm uma importância alargada, que transcende a Química, seja Académica seja Industrial – têm um alcance social muito amplo. Este facto justifica que, tal como os elementos materiais, devam ser incluídos no QCP, para que os químicos possam recordá-los sempre e mentalizar-se para dirigir sempre as suas actividades à perseguição da Sustentabilidade

Os super-elementos são três (ver a Fig. 1) e vão ser considerados a seguir por ordem crescente da sua importância para a implementação da Sustentabilidade.

Energia. O primeiro super-elemento tem um nome universalmente aceite (*Energia*), mas é vulgarmente representado por vários símbolos diferentes (E, τ , W, etc.). É conhecido desde há muito tempo, pois o seu domínio desempenhou sempre um papel importante no desenvolvimento da Civilização – foi uma das mais importantes forças mo-

trizes desta. Na realidade, emergiu logo no Paleolítico, com a actividade braçal do homem para recolha de alimentos a partir das plantas e na caça – energia muscular ou metabólica; e com o uso intermitente do fogo, mantido continuamente a partir de incêndios naturais só até que a fogueira inadvertidamente se apagava – energia térmica ou calor. Nos princípios do Neolítico, a invenção humana de fazer fogo, quando era desejado, por fricção de dois pequenos paus de madeira dura (cerca de 7000 anos a. C., em África) marca o início do domínio da energia pelo Homem. Aliás, a Revolução Neolítica, a transição da vida nómada para a vida sedentária suportada na agricultura e pecuária, consistiu, em termos de energia, num primeiro grande passo em frente da Civilização – o domínio (possível!) da fixação de energia solar pela fotossíntese das plantas cultivadas, transformando-a na energia química dos cereais e outros produtos agrícolas, a energia ingerida na alimen-

Figura 1 “Elementos” metafóricos do QCP da Sustentabilidade: super-elementos

OS SUPER-ELEMENTOS DA SUSTENTABILIDADE

“ELEMENTO” 1

Símbolo (variado!): E, τ , W, ...

Nome (universal!): ENERGIA

“ELEMENTO” 2

Símbolo (universal!): \$

Símbolo (alternativa recente, UE): €

Nome (variado!): DINHEIRO, MOEDA, CAPITAL, LUCRO, RIQUEZA, ECONOMIA, ETC

“ELEMENTO” 3

Símbolo: não atribuído

Nomes propostos tentativamente: AMBIENTE, SUSTENTABILIDADE, VERDE

tação que acciona o corpo humano. No entanto, com o Neolítico surgiu também, inadvertidamente, uma invenção inconveniente, sempre maldita depois – o trabalho: o trabalho no campo, que cansava, porque exigia energia muscular em regime continuado. Por isso, o Homem reagiu, inventando o arado manual (cerca de 3.500 anos a. C.), que exigia menos esforço que a sachola; e, depois, domesticando animais de tiro (bois, etc.) e pondo-os a puxar o arado – inventou o domínio da energia muscular animal. O domínio da energia muscular foi também responsável por um deslize civilizacional – a escravatura, para obter trabalho a partir da posse de semelhantes. Numa altura em que a posse de bens era limitada, o principal espólio que podia ser saqueado na guerra não era bens materiais, mas sim inimigos aprisionados vivos, para os escravizar e lhes explorar o trabalho braçal – o acicate do domínio da energia a funcionar, pela primeira vez, para fazer o Mal (!), que depois se repetiria em variadas situações (exemplo supremo do século XX: o domínio da energia nuclear para obter a bomba atómica).

Depois, ao longo da História, foi-se aprendendo a dominar formas de energia natural abiótica, por exemplo, utilizar a energia cinética da água dos rios (moinhos de água, inventados na Grécia, no século I a.C.) e do vento (moinhos de vento, com origem na Pérsia, século VII) para moer cereais (substituindo o trabalho braçal!). Estes maquinismos foram sendo aperfeiçoados e acabaram por permitir a conversão destas formas de energia em energia mecânica: a hídrica (cinética e potencial), para utilização em oficinas semiartesanalas (no século XVIII, por exemplo, em serrações, para accionar serras; nas oficinas de ferreiros, para movimentar os martelos para a forja do ferro, etc.) e nas primeiras fábricas de fiação e tecelagem mecânica, nos primórdios da Revolução Industrial; a eólica, para tirar água de poços ou drenar zonas inundadas (na Holanda, a partir do século XIV). Toda estes processos envolviam a produção de energia mecânica a partir de formas de *energia renovável* – ou, na linguagem actual da

Sustentabilidade, *energia verde* (com a óbvia excepção da escravatura!).

Nos fins do século XVII, a invenção da máquina a vapor, que impulsionou a Revolução Industrial, um segundo grande passo no desenvolvimento da Civilização, envolveu também o domínio da energia – mais precisamente, da transformação da energia química do carvão em energia mecânica em grandes quantidades, que permitiu o uso intenso desta em variadas actividades: produção industrial, extracção do próprio carvão (retroacção positiva no sistema de produção de energia!) e de minérios do subsolo, transportes (caminho de ferro, barcos a vapor), etc. Depois, na segunda metade do século XIX, as invenções dos motores de explosão (por Otto) e de combustão interna (por Diesel) permitiram o domínio da obtenção de energia mecânica em maquinismos auto-transportáveis, a partir de derivados de um segundo combustível fóssil, o petróleo – e trouxeram depois o transporte pessoal por automóvel (e não só), cujo uso cresceu intensamente ao longo do século XX, com consequências nefastas hoje bem conhecidas (o arado e o automóvel foram as grandes invenções que mudaram o aspecto da superfície da Terra – provocaram ambas alterações brutais na paisagem ambiental!). O desenvolvimento do automóvel implicou que o petróleo passasse a ser a fonte de energia mais utilizada. Por outro lado, a partir dos fins do século XIX começou-se a produzir energia eléctrica em larga escala – e o século XX testemunhou uma expansão enorme da sua distribuição doméstica, a serviços, à indústria, etc., que mudou muito os hábitos e a comodidade de vida. A electricidade é maioritariamente obtida por combustão de carvão, fuelóleo ou, mais recentemente, gás natural, através da produção de vapor de água sobreaquecido a alta pressão e transformação da respectiva energia de expansão em electricidade por meio de turbinas e geradores eléctricos (são também usados outros processos de produção, por exemplo, a partir da energia potencial hídrica, em barragens, da energia atómica, etc., mas com menor expressão). Enfim, o século XX testemunhou o desenvolvimento da

“civilização do carbono” – baseada na utilização de quantidades crescentes de energia produzida a partir dos combustíveis fósseis (carvão, petróleo e gás natural, todos constituídos predominantemente por carbono).

Em suma, como a energia se tornou tão fácil de obter com o avanço técnico conseguido na esteira da Revolução Industrial e tão omnipresente na nossa vida diária, além de estar tão entrosada com o desenvolvimento da civilização, acabou por atingir-se uma situação em que se lhe deixou de dar grande importância – em meados do século XX, a sociedade afluenta usava-a mas quase a ignorava! Em 1973, porém, retomou-se plena consciência da sua importância generalizada, quando ocorreu a chamada *primeira crise do petróleo*. Esta foi provocada por uma subida do preço do petróleo bruto de 70%, em Outubro daquele ano, imposta pela organização de produtores (OPEC, Organization of the Petroleum Exporting Countries), dominada pelos países árabes do Médio Oriente, para defesa dos seus interesses económicos; a que se seguiu, em Dezembro, outro aumento de 130%, provocado por mais uma guerra israelo-árabe (em que Israel foi atacado pelo Egipto e Síria), acompanhado por diminuição da produção e embargo da exportação para os EUA e a Holanda, que tinham suportado Israel naquela guerra. A escassez de petróleo provocou uma crise económica muito forte nos países desenvolvidos do Ocidente – contracção da economia, inflação elevada, etc. Esta crise provocou a reemissão da importância do petróleo, ou mais globalmente, da energia – que se passou a olhar de modo diferente: teve-se de investigar e implementar a poupança de energia na indústria, nos transportes, etc.; por exemplo, na Indústria Química, uma forte consumidora, passou-se a dar maior importância à recuperação de energia libertada nas reacções exotérmicas ou latente nos fluxos de materiais aquecidos, etc. Por outro lado, intensificou-se a prospecção de petróleo em países fora do Médio Oriente (por exemplo, México, Noruega, Reino Unido – Mar do Norte) e desenvolveram-se processos alternativos de produção de energia (gás natural,

energia nuclear, etc.). Estes esforços conduziram à normalização da situação económica – e, mais importante do que isso, a uma redução no consumo de energia por unidade de bens produzidos. O ano de 1973 já foi chamado o “último ano da energia barata” (na década de setenta o preço do petróleo aumentou dez vezes, embora depois tivesse diminuído) – daí para a frente, a energia passou a ser considerada um ingrediente escasso, que era preciso poupar e recuperar sempre que surgisse oportunidade. Para esta postura contribuiu também um célebre relatório do Clube de Roma (*The Limits of Growth*, de Meadows e Meadows) [14], publicado na mesma altura (em 1972), em que se chamava a atenção para o facto de a velocidade crescente a que se estavam a despender os recursos naturais não renováveis extraídos do subsolo, incluindo os combustíveis fósseis, passar a ser insustentável dentro de algumas décadas.

Em suma, a “redescoberta” da energia nos anos setenta do século passado trouxe consigo uma importância deste ingrediente que tem sempre de ser considerada em qualquer actividade humana, nomeadamente na indústria e, em particular, na Indústria Química: globalmente, esta é muito ávida de energia – e os químicos industriais devem recordar sempre a necessidade de o seu uso ser parcimonioso.

Dinheiro, Moeda, Economia, etc. O segundo super-elemento tem um símbolo universalmente aceite (\$), embora recentemente tenha surgido outro símbolo alternativo, que ganhou desde logo grande aceitação (€); e é conhecido por vários nomes, formais ou não: *Dinheiro, Moeda, Capital, “Massa”, Lucro, Riqueza, Economia*, etc., preferindo-se aqui este último, mais formal e de alcance mais lato.

Em contraste com o primeiro, este super-elemento não só foi descoberto como também é utilizado há muito tempo, muito antes da Química Industrial, da

Química e da própria Alquimia se terem desenvolvido – o seu uso data do Neolítico, quando o Homem começou a usar cabeças de gado como unidade padrão em trocas de bens e emergiu o conceito de *Dinheiro* como valor de troca (a palavra *pecuniário*, usada actualmente com referência ao dinheiro, deriva da palavra latina *pecus*, que significa gado!). Muito mais tarde, já na História (cerca de 2.000 anos a. C.), evoluiu-se para algo mais prático – como andar com cabeças de gado atrás quando se ia às compras era incómodo, passou-se a usar pedaços de metais como dinheiro (prata, ferro, etc.), medidos a peso ou por tamanho. No milénio seguinte (cerca de 700 anos a. C., no reino da Lídia, na Anatólia, hoje Turquia), para obstar ao incómodo de pesar ou medir o tamanho das peças de metal durante as transacções comerciais, passou-se a pôr uma marca nelas para definir e certificar o respectivo valor – surgiu a versão original da Moeda. Esta era constituída por lingotes de *electro*, uma liga de prata e ouro, com forma de feijão mas de grande tamanho, com uma marca obtida por punção com uma matriz mais dura. O uso da moeda permitia realizar os pagamentos por contagem, mais fácil e expedita que a pesagem¹, e, sobretudo, permitia separar a compra da venda (eliminar a troca!), o que incentivou muito o comércio – não foi por acaso que Cresos, o último Rei da Lídia, era dono de uma fortuna imensa, que a História registou como proverbial (o que não impediu que o seu reino fosse conquistado pelos persas, em 546 a. C.). Depois, na Grécia e em Roma, as moedas diminuíram de tamanho e adquiriram a forma de disco usada presentemente, que permitia incluir como marca a esfinge do imperador, rei, etc., que as lançava, importante para vincar o monopólio do lançamento da moeda e para a segurança da certificação (além de estimular a vaidade do mandante). Além de um meio para as trocas de bens, o dinheiro serve para exprimir preços e valores e é a medida

principal da riqueza – foi uma invenção polivalente!

A motivação de “ganhar dinheiro”, o lucro, para acumular riqueza, foi o agente motriz da quase totalidade da actividade humana desde que foi inventado o comércio e, depois, da actividade industrial em geral – e, também, obviamente, da Química Industrial. Com o avanço da Civilização, os modos de fazer crescer riqueza foram adquirindo maior complexidade e, a partir do século XVIII, desenvolveu-se uma ciência própria para os estudar, teorizar e, sobretudo, aplicar com eficácia, a Economia – a análise e descrição da produção, distribuição e consumo da riqueza, quer a nível pessoal, da empresa, etc. (microeconomia), quer a nível de agregados, nações, etc. (macroeconomia).

Em suma, são desnecessárias mais justificações para se poder afirmar que o “elemento” Economia é sempre muito importante em quase todos os empreendimentos humanos – e que não pode ser ignorado pelos químicos industriais na sua actividade, particularmente quanto à sua componente microeconómica.

Ambiente. O terceiro super-elemento teve génese mais recente: embora conhecido desde que o Homem começou a atentar no meio que o rodeava, e tivesse sido elaborado ao longo do desenvolvimento da Civilização, só emergiu com vigor na década de setenta do século XX, na esteira da publicação do livro *“Silent Spring”*, em 1962, de Rachel Carlson (1907-64), sobre os efeitos destrutivos dos pesticidas na vida dos animais selvagens [15]. Este super-elemento não tem ainda um nome bem definido, muito menos um símbolo: é um elemento muito complexo, ainda não completamente caracterizado, cuja utilização é, na prática, muito complicada e se encontra em investigação (e é de prever que assim continue durante muito tempo). Este super-elemento pode designar-se tentativamente “elemento” *Ambiente* (possíveis alternativas seriam “elemento” *Sustentabilidade* ou

(1) A propósito da mudança da pesagem para a contagem das moedas, é interessante referir que, muito mais tarde, no século XIX d. C., os químicos adoptaram a mesma solução, mas ao contrário, para medir a quantidade de átomos e moléculas: como, devido à sua escala microscópica, eram incapazes de os contar, optaram por medir analogicamente a sua quantidade “pesando massas” de elementos e compostos - surgiu o conceito de átomo-grama e molécula-grama, que depois evoluiu e originou a presente unidade de quantidade de substância, a mole.

“elemento” *Verde*), por ter embutido nele a necessidade de preservação do meio ambiente, da saúde humana e das outras espécies biológicas, e dos sistemas ecológicos que nos fornecem recursos naturais e serviços diversos, etc. – o nome Ambiente tem neste contexto um significado lato.

Este “elemento” tem a ver com o facto de a Civilização Industrial em geral, e a Química Industrial em particular, tal como foi implementada ao longo do século XX, ter proporcionado simultaneamente dois efeitos opostos. Por um lado, a sociedade industrializada proporcionou um contributo muito importante para o progresso da Civilização em muitos países (não em todos!) – prosperidade, crescimento económico, melhor qualidade e aumento da esperança de vida, etc. Por outro, a sociedade industrializada, caracterizada pela produção *massificada*, consumo *massificado* e produção *massificada* de resíduos, tem sido responsável pela destruição a ritmo desenfreado de recursos naturais [14] – quer os não *renováveis*, e por isso susceptíveis ao esgotamento, por exemplo os combustíveis fósseis e certos metais, quer os *renováveis*, consumidos a velocidade elevada e incompatível com a sua reposição, por exemplo, a madeira das florestas; e acabou por provocar fortes danos no ambiente – por exemplo, poluição dos mais diversos tipos, contaminação de espécies vivas, etc. Para conservar o ambiente e manter o progresso a longo prazo, é necessário passar a implementar a Civilização Industrial de outra maneira, baseando-a em conceitos novos – nomeadamente *Desenvolvimento Sustentável* (ou *Sustentabilidade*), *Engenharia da Sustentabilidade*, *Ecologia Industrial*, *Química Verde*, etc.

Em particular, é necessário realizar a Química Industrial de um modo diferente do vigente – introduzindo-lhe uma preocupação constante de minimizar a produção de poluentes e de resíduos, especialmente os tóxicos, aproveitar ao máximo os recursos naturais (materiais e energéticos), preparar preferencialmente compostos inócuos para a saúde humana e ecológica, etc. Este novo processo de implementar a Química Indus-

trial, embora ainda numa fase inicial de desenvolvimento, já tem um nome consagrado: é a *Química Verde*. Esta nova atitude de abordagem da Química, implícita no Desenvolvimento Sustentável e na Engenharia da Sustentabilidade, tem vindo a ganhar aceitação, está em pleno crescimento, e acabará por adquirir uma importância predominante na Química Industrial (e em muitas outras actividades industriais, e não só, em que são usados produtos químicos).

A investigação continuada das características do super-elemento Ambiente, ainda incompleta, conduziu ao aparecimento de uma série de novos conceitos, a partir dos anos setenta do século XX, com o fito de melhorar a integração da actividade humana no meio ambiente, de modo a deteriorá-lo menos. A partir da emergência do Desenvolvimento Sustentável, a natureza fundamental deste “elemento” ficou melhor definida, pelo menos em princípio, quanto ao seu objectivo: procurar atingir a Sustentabilidade, na medida do possível (na prática, porém, a definição do “elemento” Ambiente continua a ser complexa) – outra ideia fundamental que os químicos devem interiorizar.

A posição dos novos “elementos” no QCP

Caracterizados os novos “elementos”, há que discutir como se pode introduzi-los no actual QCP, para obter o QCP do Desenvolvimento Sustentável. Um primeiro ponto que vale a pena referir é que esta inclusão é compatível com a prática histórica de adicionar novos elementos no quadro, à medida que foram descobertos.

Inclusão de novos elementos no QCP.

Esta prática data da própria formulação do QCP por Mendeliev (1834-1907), que à nascença foi uma versão futurista que considerou desde logo elementos ainda não descobertos [16]. Quando Mendeliev gizou o QCP (1869-71), deixou “casas” vagas para inserir três elementos então desconhecidos, cujas propriedades previu: designou-os por eka-boro, eka-alumínio e eka-silício, por ficarem colocados por baixo dos elementos incluídos nestes nomes, numa segunda

versão do QCP (1870), dita de “forma curta”, em que os grupos foram colocados verticalmente (como na versão actual) – na primeira versão (1869) tinham sido colocados horizontalmente. A previsão funcionou como um acicate para a procura de tais elementos – a sua posterior descoberta (Escândio, em 1879, Gálio, em 1875, descoberto aparentemente sem conhecimento do QCP, e Germânio, em 1886, respectivamente) confirmou as previsões quer quanto à existência dos elementos, quer quanto às suas propriedades. O cumprimento das previsões validou as ideias de Mendeliev sobre o comportamento periódico dos elementos e contribui muito para impor definitivamente o QCP (a hipótese de periodicidade das propriedades dos elementos, confirmada como “lei periódica”, passou a integrar o corpo de conhecimento científico estabelecido).

Por outro lado, nos fins do século XX, quando foram descobertos, foram adicionados ao QCP os *gases raros*, de cuja existência até então não se suspeitava, numa coluna *ad-hoc* no fim dele (só mais tarde, quando se encontrou uma racionalização da forma do QCP, por via da quantificação da estrutura atómica, é que se comprovou que esta escolha de posição tinha sido adequada). Finalmente, nas últimas décadas, têm vindo a ser incluídos no QCP novos elementos artificiais (*transurânicos*), à medida que o seu fabrico por reacções nucleares é comprovado. Os mais recentes foram o Darmstádio (Ds, número atómico 110) [17] e o Roentgénio, (Rg, 111) [18,19]. Em suma, a história do QCP mostra que é perfeitamente lícito adicionar-lhe novos elementos.

Inclusão dos super-elementos no QCP.

Dada a sua importância e omnipresença em Química Industrial e não só, os super-elementos devem ser incluídos no QCP para que os químicos nunca os esqueçam – e, considerando a sua natureza imaterial e as relações íntimas entre eles, os três super-elementos devem constituir uma classe de elementos à parte, distinta dos grupos ou dos períodos dos elementos materiais.

Surpreendentemente, a inclusão no QCP é possível e natural: este tem, nos pri-

meiros três períodos, muito espaço desperdiçado, não ocupado por elementos. Tal como Mendeliev, quando construiu o seu QCP, deixou “casas” vagas para serem ocupadas por novos elementos a descobrir, poderia dizer-se que o espaço disponível no QCP actual estava reservado para acomodar os três super-elementos. O facto de o espaço ser generoso não levanta problemas, pelo contrário: como estes “elementos” são tão importantes que intervêm sempre em toda e qualquer reacção da Química Industrial, cada um deles merece bem um espaço aumentado, constituído por várias casas justapostas do QCP – tiras dispostas transversalmente neste (ver a Fig. 2). Os locais disponíveis no QCP podem ser designados por “0”, “00” e “000”, por ordem crescente de importância, sendo então necessário “encaixar” neles os “elementos” Energia, Economia e Ambiente.

O “elemento” Energia, quando considerado isoladamente, é, sem dúvida, o menos importante dos três: trata-se de um ingrediente com natureza semelhante à dos elementos materiais (a equação de Einstein, $E=mc^2$, é prova disso), embora mereça mais do que uma “casa” do QCP, para evidenciar que acompanha sempre todos estes, nomeadamente na realização das reacções químicas – deve-se atribuir-lhe, portanto, a posição “0”. Na realidade, a grande importância deste “elemento” provém da sua utilização alargada, mas é de natureza societária – resulta da sua interrelação com os outros dois super-elementos.

A distribuição dos “elementos” Economia e Ambiente pelos outros dois locais é mais controversa (ver a Fig. 3). Sem dúvida que estes dois super-elementos têm uma importância superior, que transcende a do elemento Energia, mas tem de se questionar qual deles deve ocupar a posição intermédia (“00”) e qual deve ficar na suprema (“000”). Na situação actual, em que a Economia domina o mundo e imperam as decisões políticas que a suportam, em detrimento da preocupação com o Ambiente, o posicionamento é nitidamente o da parte superior da Fig. 3: o “elemento” Ambiente ocupará o local “00” e o “elemento” Economia o “000” (fica no topo, pois é

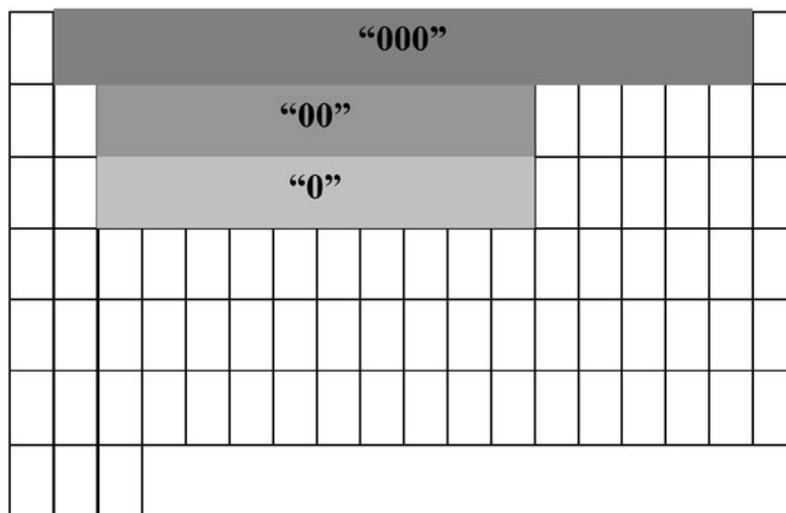
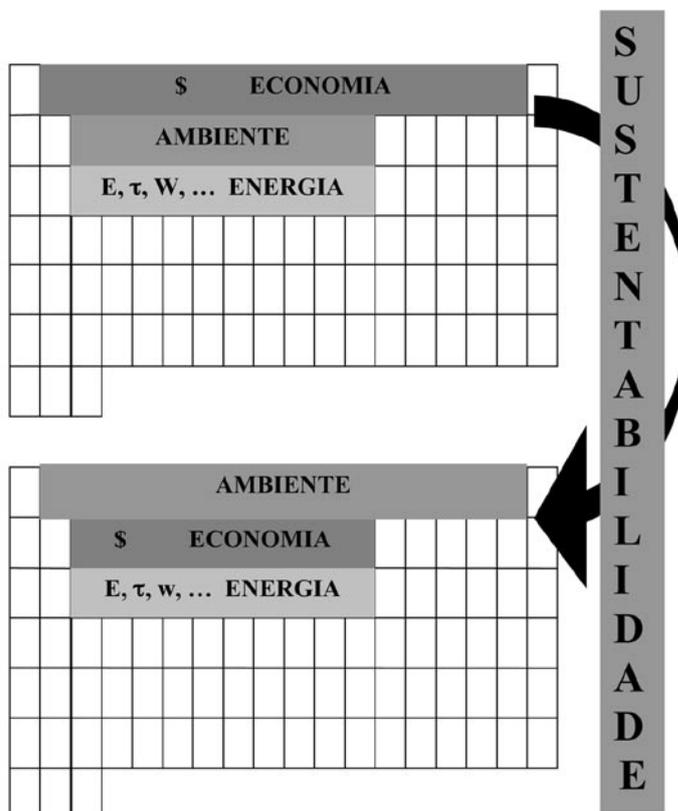


Figura 2 Os “buracos” disponíveis nos três primeiros períodos do QCP constituem ótimos locais (“0”, “00” e “000”) para encaixar três super-elementos e obter o QCP da Sustentabilidade:

o “elemento” que governa quase tudo!). Recorde-se, por exemplo, as reticências quanto à aceitação pelos EUA do acordo de Quioto sobre a limitação da produção de dióxido de carbono e outros gases de estufa – que se deve, fundamentalmente, às repercussões negativas que ela teria na economia americana.

Sustentabilidade: permuta de posições entre os super-elementos Economia e Ambiente. A colocação anterior dos “elementos” Economia e Ambiente, porém, não permite caminhar para a Sustentabilidade – a perseguição desta implica uma troca de posições dos dois super-elementos: no futuro, idealmen-

Figura 3 A versão actual do QCP da Sustentabilidade (em cima) e a sua desejável versão futura (em baixo).



te, o "elemento" Ambiente terá de subir para o local supremo "000" (parte de baixo da Fig. 3), caso contrário não se conseguirá manter o planeta Terra em condições de suportar os humanos em sucessivas gerações. Para operar a mudança de posição (leia-se: para conseguir o Desenvolvimento Sustentável), a sociedade terá de aprender a manejar conjuntamente os "elementos" Economia e Ambiente de modo a trocar as suas posições no QCP. Para isso, o crescimento económico terá de ser feito com uma profunda e permanente preocupação com o ambiente, de modo a remediar os efeitos nocivos que o desenvolvimento dominado apenas pelo super-elemento Economia provocou ao longo do século XX e a promover a plena conservação da ecossfera.

Dada a situação e mentalidade vigente, o processo de mudança de posições será lento e difícil, até porque pode exigir uma certa contracção nas comodidades que os cidadãos dos países avançados actualmente usufruem. No entanto, a Química Verde e a Ecologia Industrial

podem potenciar algumas das alterações necessárias, porque permitem satisfazer os requisitos económicos sem deteriorar simultaneamente o ambiente – por isso, têm garantido um papel importante nas mudanças a concretizar.

Justificação histórica da permuta. Para justificar a permuta, pode-se concluir como se começou esta secção, recordando que também Mendeliev teve de trocar posições de pares de elementos para os colocar no QCP em posições definitivas – as chamadas "inversões" (nomeadamente Níquel/Cobalto e Iodo/Telúrio – mais tarde, foram identificadas outras duas). As inversões decorriam de ele utilizar a massa atómica como variável característica definidora dos elementos e não o número atómico, hoje usado como número de ordem dos elementos no QCP (o número atómico só emergiu como grandeza definidora dos elementos após se ter descoberto as partículas subatómicas e formulado a estrutura quântica do átomo – é o número de prótons no núcleo atómico). Afinal, também a troca de lugares entre os "elementos"

Economia e Ambiente tem precedentes no QCP real, o que mostra a sua exequibilidade.

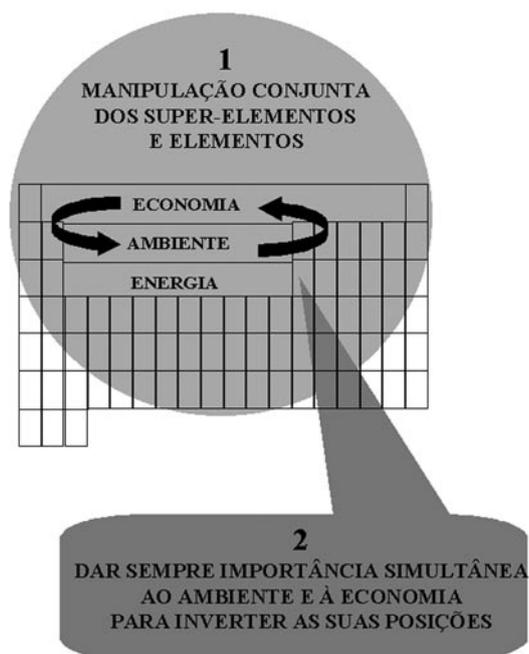
Conclusão: mensagens da metáfora do QCP da Sustentabilidade

A metáfora do QCP da Sustentabilidade permite transmitir eficazmente aos químicos e demais utilizadores de substâncias químicas duas mensagens globais (ver a Fig. 4): primeira, devem mentalizar-se para, ao manipular os compostos nas reacções químicas, ter sempre em atenção não só os elementos materiais que os constituem, como também os super-elementos – atender sempre aos aspectos energético e económico e às consequências ambientais das reacções que executam; segunda, no âmbito desta atitude holística, devem dar sempre tanta importância aos aspectos ambientais como aos económicos e perseguir a inversão da valorização relativa deles (para ir realizando, paulatina mas voluntariamente, a troca de posições dos super-elementos Ambiente e Economia no QCP).

É claro que a troca de posições (leia-se, a perseguição da Sustentabilidade) é de implementação difícil e não pode ser feita instantaneamente – é uma tarefa formidável. Mas também a formulação do QCP por Mendeliev o foi: por um lado, foi um exercício de pensamento holístico, ao contrário da corrente dominante na altura, o pensamento reducionista do racionalismo cartesiano (a investigação em Química era então dirigida ao nível microscópico – procurava-se esclarecer a composição das substâncias em termos de átomos e moléculas); por outro, foi feito sem estar disponível o método usado, que foi divisado pela primeira vez para a formulação do QCP, ainda que nebulosamente – segundo o próprio confessou, a formatação do QCP surgiu a Mendeliev em sonhos (mas após andar três dias a pensar intensamente no problema) [20]. O método era tão inovador que não teve qualquer observação experimental a inspirá-lo, como o banho de Arquimedes (287-267 a. C.), que o terá feito perceber o princípio da impulsão (*Eureka!* Tradução: Descobri!), ou a maçã de Newton (1642-1727), que o terá iluminado na formulação das leis

Figura 4 Mensagens da metáfora do QCP da Sustentabilidade

MENSAGENS DA METÁFORA DO QUADRO DE CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DA SUSTENTABILIDADE



da gravidade – teve de recorrer-se ao sonho para “explicar” a sua descoberta misteriosa! Em suma, a génese do QCP foi um feito notável mesmo em termos dela própria. Quanto aos seus resultados, foram também impressionantes: permitiu o primeiro grande avanço sistémico de racionalização global da química (daí a designação “Sistema de Elementos” usada no título do primeiro artigo de Mendeliev sobre o QCP, 1869) [20] e, por isso, alterou completamente a percepção que se tinha deste ramo do saber – trouxe-lhe uma visão global e unificadora (até então, usando as palavras do próprio Mendeliev, “os elementos eram factos meramente fragmentários e incidentais da Natureza”) [21].²

Em suma, o gizamento do QCP mudou radicalmente a percepção que se tinha da Química – e conferiu-lhe pela primeira vez a característica de uma ciência racional. Por todas estas razões, Mendeliev concretizou uma verdadeira Revolução Científica, no sentido que lhe deu Kuhn [24] – um daqueles raros momentos de verdadeiro avanço da ciência em que o paradigma do saber estabelecido é substituído por outro novo, radicalmente diferente. Tais momentos constituem passos em frente gigantescos na aquisição de conhecimento pelo Homem. Por isso, Mendeliev é um bom exemplo para os químicos seguirem na adopção de uma visão holística da Química em que envolvam não só os elementos materiais como também os super-elementos, para concretizar a inflexão da trajectória actual da Civilização para uma via que conduza à Sustentabilidade – e a metáfora do QCP da Sustentabilidade pode ser muito útil

para lhes fazer ter sempre presente a importância desta tarefa gigantesca e a necessidade de envolverem sempre os três “elementos” adicionais nas suas actividades profissionais.

Referências

1. E. Montuschi, ‘Metaphor in Science’, em W. H. Newton-Smith (ed.), *A Companion to the Philosophy of Science*, Blackwell, Oxford (2001) 277-282.
2. T. L. Brown, *Making Truth – Methapor in Science*, University of Illinois Press, Urbana, 2003.
3. H. Beall, *J. Chem. Ed.* **76** (1999) 366-368.
4. N. Bhusham e S. Rosenfeld, *J. Chem. Ed.* **72** (1995) 578-582.
5. C. W. Bowen, *J. Chem. Ed.* **69** (1992) 479-482.
6. K. W. Watkins, *J. Chem. Ed.* **66** (1989) 1020.
7. B. Hutchinson e C. Willerton, *J. Chem. Ed.* **65** (1988) 1048-1049.
8. J. Bernstein e S. S. Shaik, *J. Chem. Ed.* **65** (1988) 339-340.
9. I. Asimov, *J. Chem. Ed.* **36** (1959) 535-538.
10. A. Johansson, ‘Industrial Ecology and Industrial Metabolism: Use and Misuse of Metaphors’, em R. U. Ayres e L. W. Ayres (eds), *A Handbook of Industrial Ecology*, E. Elgar, Cheltenham (2002) 70-75.
11. S. Erkman, *J. Cleaner Prod.* **5** (1997) 1-10.
12. T. Graedel, ‘Industrial Ecology: Definition and Implementation’, em R. Soclow, C. Andrews, F. Berkout e V. Thomas (eds), *Industrial Ecology and Global Change*, Cambridge University Press, Cambridge (1994) 23-41.
13. R. U. Ayres, ‘Industrial Metabolism’, em J. H. Ausubel e H. E. Sladovich, *Technology and the Environment*, National Academy Press, Washington (1989) 232-49.
14. D. H. Meadows, D. L. Meadows, J. Randers e W. W. Behrens III, *The Limits to Growth*, Pan, Londres, 1974.
15. R. Carson, *Silent Spring*, Penguin, Londres, 1999 (com um Posfácio de L. Lear).
16. M. D. Gordon, *A Well-ordered Thing – Dmitrii Mendeleev and the Shadow of the Periodic Table*, Basic, N. Iorque, 2004.
17. J. Corish e G. M. Rosenblatt, *Pure Appl. Chem.* **75** (2003) 1613-1615.
18. P. J. Karol, H. Nakahara, B. W. Petley e E. Vogt, *Pure Appl. Chem.* **75** (2003) 1601-1611.
19. IUPAC, *Chemistry International* **27**(1) (2003) 16.
20. P. Strathern, *Mendeleev’s Dream – The Quest for the Elements*, Hamish Hamilton, Londres, 2000, 262-294.
21. A. Findlay, *A Hundred Years of Chemistry*, 2.ª ed., Duckworth, Londres, 1948, 543 e 52.
22. J. Gribbin, *Science – A History (1543-2001)*, Penguin, Londres, 2002, 375-376.
23. E. R. Malinowski, *Factor Analysis in Chemistry*, 2.ª ed., Wiley-Interscience, N. Iorque, 1991, ix.
24. T. S. Kuhn, *The Structure of Scientific Revolutions*, 3.ª ed., The University of Chicago Press, Chicago, 1996.

(2) Deve referir-se que Mendeliev, no fundo, usou precocemente uma técnica de análise estatística multivariada de dados, a análise de aglomeração, presentemente muito utilizada em Quimiometria (a estatística só foi teorizada mais tarde, na passagem do século XIX para o XX, por Pearson e sua escola). Por isso, Mendeliev deve ser considerado um dos “pais” da Quimiometria, conjuntamente com Cannizaro (1826-1910). Este também usou um raciocínio global (apresentado num panfleto em 1858, e no primeiro congresso internacional de químicos de sempre, realizado em Karlsruhe, em 1860) [20], para obter simultaneamente as massas atómicas dos elementos e os coeficientes estequiométricos nas fórmulas dos compostos a partir de uma matriz bidimensional (elementos x compostos) de volumes de combinação de elementos gasosos numa série de compostos formados a partir deles [22] – e resolver finalmente as questões de obter com segurança as massas atómicas e as fórmulas, até então objecto de muita polémica e dúvida. O raciocínio de Cannizaro foi um caso temporário de análise de factores, outra técnica quimiométrica actual, que só foi formalmente desenvolvida no início dos anos 30 do século XX [23]. Mendeliev e Cannizaro, portanto, devem ser considerados os precursores da Quimiometria – praticaram prematuramente técnicas de tratamento de dados que só décadas mais tarde foram teorizadas, e só ainda mais tarde, passadas mais outras tantas décadas, passaram a ser usadas pelos químicos (e nem Mendeliev nem Cannizaro tinham computador!).

Análise Calorimétrica aplicada a Polímeros Biológicos

Parte I: Fundamentos Teóricos

MARIA HELENA CASIMIRO¹, JOÃO PAULO LEAL^{2,3}
M. HELENA GIL⁴, CARLOS A. NIETO DE CASTRO^{3,*}

Resumo Pretende-se com este trabalho ilustrar a importância do conhecimento aprofundado da estrutura e comportamento dos polímeros biológicos, evidenciando a versatilidade da análise calorimétrica na caracterização dessas macromoléculas e das suas possíveis interações. Numa primeira parte efectua-

-se uma breve visita a alguns dos fundamentos das técnicas calorimétricas com aplicabilidade nesta área, enquanto que na segunda parte se apresentam alguns exemplos da aplicabilidade e versatilidade das técnicas calorimétricas na análise de macromoléculas biológicas.

Introdução

O conhecimento aprofundado da estrutura das macromoléculas biológicas, quer sejam proteínas, ácidos nucleicos, polissacarídeos, membranas biológicas, etc., permite esclarecer as suas funções enquanto compostos intervenientes no processo metabólico dos seres vivos.

Este conhecimento reveste-se actualmente de particular relevância em virtude de poder ser utilizado na concepção de novas aplicações biomédicas (fármacos e/ou dispositivos médicos), assim como na obtenção de moléculas modificadas com propriedades melhoradas para aplicação a nível industrial.

Os polímeros biológicos apresentam-se bastante mais complexos do que as moléculas orgânicas comuns. Esta complexidade advém do elevado número de átomos presentes numa macromolécula biológica e da possibilidade de rotação relativamente livre em torno das muitas ligações covalentes da macromolécula. Assim, as reduzidas barreiras energéticas rotacionais proporcionam a este tipo de moléculas flexibilidade e elevada

complexidade conformacional e, conseqüentemente, o número de estruturas tri-dimensionais teoricamente possíveis que uma macromolécula pode apresentar é enorme. Não obstante, cada polímero biológico adopta uma conformação tri-dimensional distinta, a que lhe é mais favorável em termos energéticos, designada por conformação nativa.

Por outro lado, a nível biológico, as possíveis interações entre diferentes macromoléculas com elevada especificidade, por exemplo proteína-ADN, hormona-receptor, anticorpo-antigene, etc., ilustram bem a complexidade e diversidade dos mecanismos envolvidos no reconhecimento molecular. A importância de tais interações nos processos biológicos é indiscutível, revestindo-se de grande interesse a determinação da natureza das forças intervenientes em cada uma delas.

Atendendo ao exposto, facilmente se depreende que a compreensão das macromoléculas biológicas e das suas interações passa não só pelo conhecimento da sua estrutura, mas também pelo conhecimento das componentes

energéticas associadas a estas interações. No entanto, nem sempre os meios técnicos disponíveis proporcionaram este tipo de abordagem.

Nos últimos anos a inovação tecnológica tem possibilitado o desenvolvimento de novos métodos de análise. Destes novos métodos, destacam-se em lugar cimeiro os métodos calorimétricos, de elevada sensibilidade, capazes de fornecer informação directa acerca da energia envolvida nos processos anteriormente mencionados. A esses processos encontra-se associada a libertação e/ou absorção de energia calorífica, podendo assim ser representadas em termos de variações térmicas.

Estes métodos calorimétricos, juntamente com toda uma vasta gama de técnicas analíticas que permitem medir alterações das propriedades químicas e/ou físicas de uma amostra em função da temperatura, constituem aquilo a que se designa de um modo generalizado por Análise Térmica.

1 Departamento de Física, Instituto Tecnológico e Nuclear, 2686-953 Sacavém, Portugal

2 Departamento de Química, Instituto Tecnológico e Nuclear, 2686-953 Sacavém, Portugal

3 Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1749-016 Lisboa; e-mail:cacastro@fc.ul.pt

4 Departamento de Engenharia Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade de Coimbra, Pólo II Pinhal de Marrocos, 3030-290 Coimbra, Portugal

Análise Térmica

O termo Análise Térmica (*Thermal Analysis*, TA) é, tal como já foi mencionado, frequentemente utilizado para descrever técnicas analíticas que investigam o comportamento de amostras em função da temperatura. Com efeito, quando submetida a uma variação de temperatura, uma dada substância pode sofrer alterações físicas e/ou químicas, reagir com os componentes do meio ambiente, perder água de cristalização, etc., sendo que muitas dessas transformações são acompanhadas pela perda ou absorção de energia calorífica.

A Confederação Internacional de Análise Térmica e Calorimetria (ICTAC) define análise térmica como um grupo de técnicas analíticas nas quais uma propriedade da amostra é monitorada em função da temperatura ou do tempo, enquanto a amostra é sujeita a um variação programada de temperatura em atmosfera específica. Acrescenta ainda que essa variação pode envolver aquecimento ou arrefecimento, a velocidade fixa ou variável, manutenção da amostra a temperatura constante, ou qualquer sequência destas três possibilidades. Resumindo, a análise térmica engloba um grupo de técnicas que permitem estudar as propriedades físicas de uma substância e/ou a sua reactividade em função da temperatura.

As técnicas mais comuns são:

DSC – *Differential Scanning Calorimetry* ou Calorimetria Diferencial de Varrimento. Mede a energia calorífica absorvida ou libertada durante o aquecimento ou arrefecimento de uma substância, em relação a uma amostra de referência.

DTA – *Differential Thermal Analysis* ou Análise Térmica Diferencial. Mede a variação de temperatura decorrente de reacções e/ou transformações físicas durante o aquecimento ou arrefecimento da amostra em estudo, em relação a uma amostra de referência.

TG – *Thermogravimetric Analysis* ou Termogravimetria. Mede a variação de massa durante o aquecimento ou arrefecimento da amostra.

TMA – *Thermomechanical Analysis* ou Análise Termomecânica. Mede a variação dimensional durante o aquecimento ou arrefecimento da substância em estudo.

DMA – *Dynamic Mechanical Analysis* ou Análise Mecânica Dinâmica. Mede a resposta mecânica sob uma tensão periódica (frequência) durante o aquecimento ou arrefecimento.

Apesar de nem sempre ser amplamente divulgada, convém ainda fazer referência a uma outra técnica: a ITC – *Isothermal Titration Calorimetry* ou Calorimetria Isotérmica de Titulação. Esta técnica mede directamente a energia calorífica libertada ou absorvida numa reacção, a qual é registada em função do tempo ou do reagente titulante.

Dada a grande versatilidade das técnicas anteriormente mencionadas, estas podem ser utilizadas para caracterizar uma vasta gama de materiais para além de polímeros biológicos, nomeadamente outras classes comuns de materiais orgânicos e inorgânicos, como cerâmicas, vidros, metais e ligas, fibras, plásticos, compósitos, etc. Consequentemente as áreas de aplicação estendem-se desde o domínio científico ao industrial, onde adquire particular importância nas Industrias Farmacêutica e da Cosmética, Alimentar, dos Polímeros, seja na fase de investigação e desenvolvimento de um processo ou produto, seja na fase de controlo de qualidade de matérias primas e produtos. Esta grande aplicabilidade advém não só da capacidade destas técnicas em caracterizar quantitativa e qualitativamente uma enorme variedade de materiais, como também pelo facto de o poderem fazer num intervalo alargado de temperaturas.

Estas características acabam por se traduzir por um conjunto de vantagens laboratoriais relativamente a outros métodos analíticos, das quais se pode salientar [1]:

- i) A amostra pode ser estudada num intervalo considerável de temperaturas utilizando programas de aquecimento/arrefecimento variados;

- ii) Praticamente qualquer estado físico da amostra (sólido, líquido, em solução, ou gel) pode ser estudado;

- iii) Apenas é necessária uma pequena quantidade de amostra (0.1 µg-10 mg);

- iv) A atmosfera envolvente da amostra pode ser seleccionada em função da análise pretendida;

- v) O tempo requerido para completar um ensaio pode variar de apenas alguns minutos até algumas horas.

Paralelamente a estas vantagens, trata-se ainda de um equipamento de fácil operação que possibilita uma elevada eficiência e produtividade. De facto, uma vez preparado e programado o ensaio, todas as funções, incluindo variações da temperatura e de atmosfera, são executadas automaticamente. Esta “independência” da técnica relativamente ao operador é resultante da configuração do próprio equipamento.

De um modo geral um equipamento de TA inclui um sensor da propriedade física, um forno de atmosfera controlada e um programador, a maioria das vezes constituído por um computador. O programador constitui o módulo de registo e processamento de dados para além de controlar a evolução dos ensaios (intervalos de temperatura, velocidade de aquecimento/arrefecimento, fluxo de gás de purga, etc.).

Actualmente é comum encontrar apenas um programador a funcionar com diferentes módulos de análise térmica. Na Figura 1 representa-se de modo esquemático uma possível combinação desta instrumentação.

Análise Calorimétrica

Calorimetria diferencial de varrimento (DSC)

A calorimetria diferencial de varrimento é uma técnica de análise térmica que regista o fluxo de energia calorífica associado a transições nos materiais em função da temperatura. É um método de variação entálpica, no qual a diferença no fornecimento de energia calorífica entre uma substância e um material

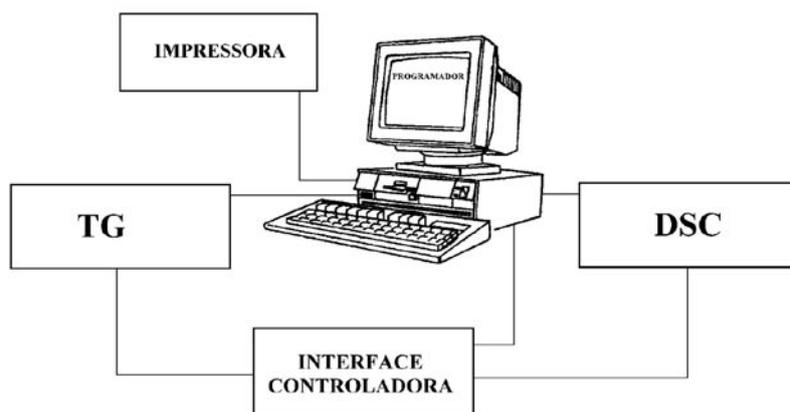


Figura 1 Representação esquemática de instrumentação TG-DSC.

de referência é medida em função da temperatura, enquanto a substância em estudo e a referência são submetidas a um mesmo programa de aquecimento, ou arrefecimento, rigorosamente controlado.

Estas medidas fornecem dados qualitativos e quantitativos em processos endotérmicos (absorção de energia calorífica) e exotérmicos (libertação de energia calorífica), permitindo obter informações referentes a alterações de propriedades físicas e/ou químicas como, por exemplo [2, 3]:

- Temperaturas características (temperatura de fusão, cristalização, transição vítrea).

- Grau de cristalinidade de um polímero.
- Diagramas de fase.
- Entalpias de transição de fase e de reacção.
- Estabilidade térmica e oxidativa.
- Grau de pureza.
- Cinética de reacções.

Por este motivo, tal como a maioria das restantes técnicas de análise térmica, a técnica de DSC é amplamente aplicada na caracterização de materiais orgânicos e inorgânicos, cristalinos e amorfos, assim como nas indústrias já anteriormente referidas.

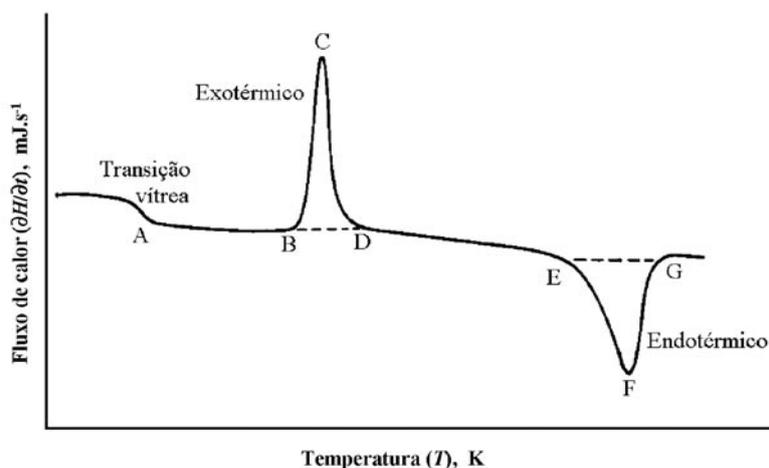


Figura 2 Curva genérica de DSC para um composto polimérico. $\partial H/\partial t$ corresponde ao fluxo de energia calorífica (adaptado de [3]).

Como limitações desta técnica refira-se a dificuldade de interpretação (acontece alguma reacção, mas qual?), requerendo normalmente outros métodos complementares para a interpretação dos resultados. Para além disso necessita de calibração em toda a gama de temperatura. Daí o seu acoplamento com outras técnicas analíticas, como a espectrometria de massa, a espectrometria de infravermelhos de transformadas de Fourier, e a cromatografia de fase gasosa, entre outras, para além das combinações com outras técnicas de análise térmica, como a termogravimetria.

A Figura 2 representa uma curva típica de DSC de uma amostra polimérica.

Em ordenadas representa-se $\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_p$, que corresponde ao fluxo de energia calorífica (variação da entalpia por unidade de tempo) a pressão constante. Dado que a grande maioria dos processos estudados em fases condensadas se processa a pressão constante, e para facilidade de escrita, deixaremos no texto de introduzir o índice; $\partial T/\partial t$ é a taxa de variação da temperatura durante o varrimento e $(\partial H/\partial t)/(\partial T/\partial t)$, ou seja $\partial H/\partial T$, corresponde à capacidade calorífica a pressão constante da amostra, C_p .

A interpretação dos dados contidos nesta curva leva à identificação de diferentes regiões da mesma. Assim, o pico BCD representa um pico exotérmico, situação em que a temperatura da amostra aumenta relativamente à temperatura do material de referência. Está associado a um decréscimo da entalpia de uma fase ou de um sistema químico. Cristalização, reacções de oxidação ou algumas reacções de decomposição estão associadas a uma libertação de energia calorífica e produzem este género de picos.

O segmento EFG, ilustra um pico endotérmico que pode corresponder a transições de fase, reacções de redução ou algumas reacções de decomposição, correspondendo a uma absorção de energia calorífica. Neste caso em particular representa a temperatura de fusão do material polimérico.

O ponto A, que é acompanhado por um pequeno deslocamento relativamente à

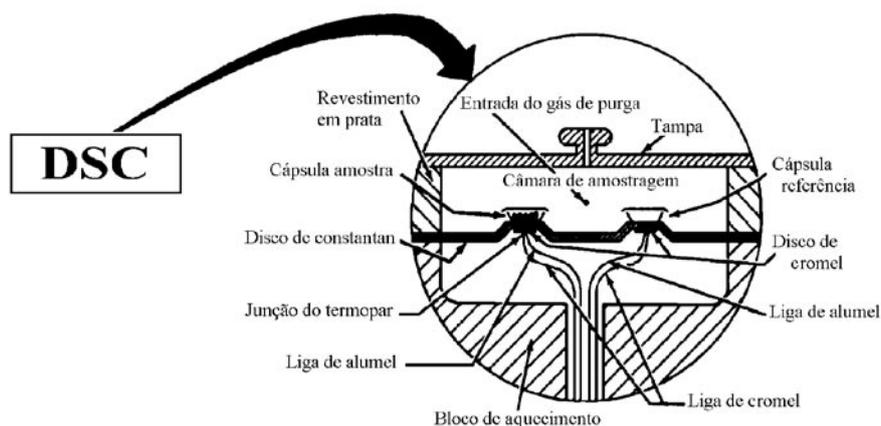


Figura 3 Representação esquemática da secção transversal de um equipamento de DSC da DuPont (adaptado de [3]).

linha de base, corresponde à temperatura de transição vítrea de um polímero. Surge sempre acompanhada de uma variação da capacidade calorífica da amostra.

A variação total de entalpia atribuída a determinado pico, é calculada com base na sua área (formada por exemplo, pelos segmentos BC, CD e DB, no caso do pico exotérmico da Figura 2).

Princípios operacionais

Todos os calorímetros DSC têm em comum várias características. A mais importante, e motivo pelo qual são designados por calorímetros diferenciais de varrimento, é que as medições térmicas são feitas de modo diferencial e contínuo entre duas células.

De acordo com os princípios operacionais, os calorímetros diferenciais de varrimento podem ser divididos em dois tipos: de compensação de potência e de fluxo de energia calorífica [4].

Nos DSC do tipo fluxo de energia calorífica a diferença de temperatura entre a amostra e a referência é medida em função da temperatura ou do tempo, sob condições de temperatura controlada, sendo a diferença de temperatura proporcional à variação do fluxo de energia calorífica ($\partial H/\partial t$). A estrutura de um sistema deste tipo encontra-se

representada na Figura 3, para um calorímetro da DuPont.

Existe um conjunto de termopares que se encontram ligados sob cada uma das plataformas onde se colocam a amostra e a referência sendo, no caso particular do equipamento da DuPont, constituídos por ligas de cromel e alumel. Um segundo conjunto de termopares mede a temperatura do bloco de aquecimento, no referido caso formados pela junção do disco de constantan de condutibilidade térmica elevada e de um disco de cromel que cobre a parte inferior de cada uma das plataformas. O facto de a temperatura do bloco de aquecimento ser controlada por um sistema de termopares independentes localizados no próprio bloco, permite programar a velocidade de aquecimento de forma variada, tornando também possível a realização de ensaios isotérmicos.

Quando o bloco de aquecimento é aquecido, ou arrefecido, a uma velocidade programada, as temperaturas da amostra e da referência aumentam, ou diminuem, uniformemente. Durante uma transformação (transição de fase, reacção, fusão, etc.) a amostra liberta ou absorve energia calorífica o que provoca alterações do fluxo de energia calorífica através do disco e, consequentemente, variações na diferença de temperatura entre a amostra e a referência permitin-

do a estimativa da entalpia associada a essa transformação [1-3].

Nos calorímetros diferenciais de varrimento do tipo compensação de potência, o princípio operacional é diferente do anteriormente apresentado. As células ou plataformas onde se colocam a amostra e a referência encontram-se equipadas individualmente com um sensor de resistência, que mede a temperatura de cada uma, e uma resistência de aquecimento. Quando é detectada uma diferença de temperatura entre a amostra e a referência devido a uma alteração da amostra, é adicionada energia térmica ($\partial H/\partial t$) a uma das células de modo a manter um diferencial de temperaturas nulo entre ambas ($T_{amostra} = T_{ref}$). Uma vez que essa quantidade de energia é exactamente equivalente à quantidade de energia absorvida ou libertada na transformação ocorrida na amostra, o seu registo fornece uma medida calorimétrica directa da energia associada à transformação [1,4].

Como todos os instrumentos de medida, os aparelhos de DSC apresentam um certo tempo de resposta devido a alguma resistência térmica, o que se traduz pelo aparecimento de desvios da linha de base. Para aumentar o rigor das determinações o sinal calorimétrico (SC) determinado pelo aparelho, e que corresponde a $\partial H/\partial t$, é calibrado [4,5] determinando-se uma constante de ca-

libração K , tal que $K = \frac{SC}{\dot{Q}_{real}}$, sendo \dot{Q}_{real} o fluxo de energia calorífica realmente dissipado na célula¹. A constante K é assim função da temperatura, da atmosfera em torno das células e de quaisquer resistências que conduzam a perdas de energia calorífica.

A calibração para a entalpia pode ser feita por efeito Joule através de uma sonda de propriedades térmicas conhecidas, como é o caso de calorímetros DSC da SETARAM, ou, tanto para a entalpia como para a temperatura, com materiais de referência² (metais, cerâmicas ou líquidos) com propriedades bem definidas na região de temperaturas que se pretende trabalhar e utilizando diferentes velocidades de aquecimento/arrefecimento, visto que a temperatura a que ocorre uma dada transformação está dependente da velocidade de varimento.

As temperaturas de fusão de padrões como o índio, estanho, chumbo, etc., são utilizadas para calibrar a temperatura indicada pelo equipamento, enquanto que a entalpia de fusão destes metais é utilizada na calibração do sinal calorimétrico.

Em termos experimentais estas características traduzem-se por alguns benefícios práticos. Por exemplo, além de possibilitarem medidas de baixos valores de variação de entalpia, possibilitam ainda a utilização de pequenas quantidades de amostra (geralmente entre 5 e 20mg). Esta última particularidade revela-se de grande utilidade visto que muitas vezes os ensaios são destrutivos. O tempo de cada ensaio depende da velocidade de aquecimento/arrefecimento utilizada (geralmente 5 a 20°C/min) e da gama de temperaturas a ensaiar, podendo durar de alguns minutos a algumas horas.

Calorimetria isotérmica de titulação (ITC)

A calorimetria isotérmica de titulação é uma técnica analítica que, tal como as técnicas de TA anteriormente referidas,

é amplamente usada em áreas de investigação muito diferentes (química e bioquímica, física e biofísica, biotecnologia, biomedicina, farmacologia), assim como nas indústrias de cosméticos, alimentação, processos de controlo, etc.

Basicamente, a técnica de calorimetria isotérmica de titulação permite a medição directa da energia calorífica libertada ou absorvida ao longo de uma reacção, em que o que está em jogo são interacções inter- e intra-moleculares. Face a esta explicação, facilmente se compreende a sua aplicação a polímeros biológicos, pois associações como proteína-ligando, proteína-proteína e proteína-ADN/ARN são exemplos entre outros, de indubitável interesse. Nestes casos, se o efeito térmico da interacção for suficientemente grande, a estequiometria, a entalpia de formação e a constante de equilíbrio de formação destes complexos, geralmente denominada de constante de união do complexo, pode ser determinada sem ambiguidade. Deste modo, a energia de Gibbs de formação do complexo pode ser calculada:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_{eq} \quad (1)$$

e consequentemente também a entropia do processo [6]:

$$\Delta S^0 = \left(\frac{\Delta H^0 - \Delta G^0}{T} \right) \quad (2)$$

Se este procedimento de titulação calorimétrica for repetido a diferentes temperaturas será possível determinar a variação da capacidade calorífica. Este parâmetro reveste-se de particular importância pois permite, por exemplo, estimar os efeitos da desidratação de grupos polares e apolares que acompanham a formação do complexo.

O êxito desta técnica deve-se principalmente a um conjunto de vários factos relevantes. A maioria das interacções liberta ou absorve energia sob a forma de energia calorífica. Esta energia calorífica é medida directamente a pressão constante, ou seja, pode afirmar-se que a entalpia efectiva da reacção é medida

de forma directa. Por outro lado, existe actualmente uma base metodológica e teórica bem estabelecida para analisar dados experimentais, incluindo os de sistemas relativamente complexos, o que proporciona a determinação da estequiometria e dos parâmetros termodinâmicos da reacção em estudo. No entanto, dada a inespecificidade intrínseca na detecção do efeito térmico, e a consequente incapacidade da titulação calorimétrica em detectar a interacção que origina a energia calorífica, é necessário recorrer à ajuda de outras técnicas específicas para interpretar os valores dos parâmetros termodinâmicos em termos moleculares.

Princípios operacionais

Adoptando como critério de classificação o princípio de funcionamento, os calorímetros isotérmicos de titulação de elevada sensibilidade utilizados em estudos de interacção de biopolímeros, podem ser englobados em duas categorias. Por um lado aqueles que utilizam um bloco de elevada capacidade calorífica, a temperatura constante, e que se baseiam na condução de energia sob a forma de energia calorífica através de sensores que detectam o efeito térmico produzido pela interacção. Por outro, aqueles que se podem chamar de adiabáticos visto que funcionam por compensação do efeito térmico num compartimento adiabático.

O primeiro tipo de calorímetro ITC a que se fez referência corresponde em geral à configuração esquematizada na Figura 4. Pode observar-se uma configuração diferencial com duas células, em que uma actua como vaso de reacção e a outra como referência. Os efeitos térmicos produzidos em cada uma das células são detectados pelos correspondentes sensores ou termopares ligados em oposição. Nos casos de máxima simetria utilizam-se seringas de injeção idênticas contendo um dos reagentes, geralmente o ligando, L, que irá interagir com o biopolímero, B, dissolvido

¹ Utiliza-se a notação matemática da derivada em ordem ao tempo da grandeza com o ponto superior.

² De preferência certificados (MRC), onde se certifica, p.ex. a entalpia e temperatura de fusão de metais puros.

num tampão T (o mesmo no qual se dissolve a macromolécula).

A agitação mantém-se durante o processo de injeção, que ocorre simultaneamente em ambas as células. Uma das células, a célula de reacção, contém a solução do biopolímero, enquanto que a outra, célula de referência, contém apenas o tampão.

Não obstante, alguns calorímetros deste tipo não incluem a injeção nem a agitação simultânea de ambas as células. Nestes casos torna-se necessário efectuar um ensaio em branco para determinar os efeitos térmicos associados principalmente à agitação.

O outro tipo de calorímetro mencionado e que se encontra representado na Figura 5 é actualmente um dos equipamentos mais difundidos na comunidade científica especializada em estudos de interacção em cinéticas enzimáticas e em processos que conduzem ao enrolamento de proteínas, e em interacções do tipo proteína-pequenos ligandos, enzima-inibidor, proteína-proteína, hormona-receptor e ADN-proteína.

Como anteriormente referido, trata-se de um calorímetro que funciona por compensação do efeito térmico num compartimento adiabático. Sendo um calorímetro diferencial, faz um uso passivo da célula de referência. Ambas as células calorimétricas têm a forma de cilindros planos (com elevada relação base/altura do cilindro) sobre cujas faces externas se estendem finas termolâminas.

Durante um ensaio uma pequena potência constante e com uma tensão inferior a um milivolt é dissipada na termolâmina da célula de referência, activando-se o sistema de compensação que iguala as temperaturas de ambas as células e produz a linha de base experimental. Um efeito exotérmico ou endotérmico afasta temporariamente a potência de compensação do valor estacionário, produzindo-se um pico característico sobre a linha de base de cuja integração se extrai a energia calorífica implicado no processo. As células encontram-se suspensas somente através de largos tubos de acesso no interior de um cilindro.

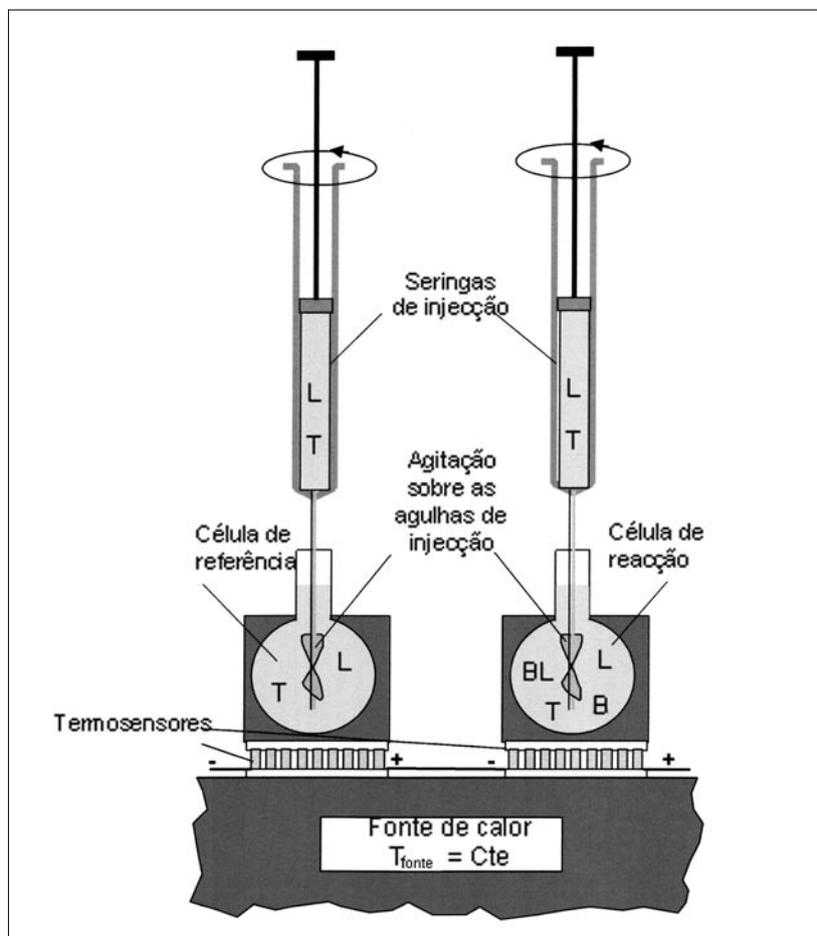


Figura 4 Esquema geral de um calorímetro isotérmico de titulação baseado no princípio da condução de energia sob a forma de energia calorífica através de sensores de baixa impedância térmica. L, T e B representam respectivamente moléculas de ligando, de tampão e de biopolímero (adaptado de [6]).

Com o objectivo de proporcionar um compartimento adiabático para as células, a temperatura deste cilindro é controlada de forma a mantê-la tão próxima da temperatura das células quanto possível. Para isso uma termopilha mede continuamente a diferença de temperatura entre células e cilindro e um sistema de controlo em circuito fechado actua sobre uma termolâmina distribuída uniformemente sobre a superfície do cilindro. Relativamente ao controlo da temperatura, consegue-se através da circulação de água a partir de um banho termostático exterior. Para acentuar o controlo adiabático e eliminar a condensação de vapor de água, tanto mais importante quanto menor a temperatura de trabalho, faz-se vácuo no interior do cilindro.

O sistema de injeção-agitação é uma das partes mais críticas do equipamento. Do seu correcto funcionamento depen-

de a fiabilidade dos volumes de injeção (de 2 a 5 μL num ensaio padrão), da eficácia da homogenização da mistura reaccional e de um baixo nível de ruído compatível com a elevada sensibilidade requerida para detectar os efeitos térmicos, geralmente de apenas algumas dezenas de microjoules. As seringas de injeção são seringas de precisão em vidro providas com longas agulhas de aço inoxidável que têm no seu extremo uma pequena palheta para agitação.

Em ambos os tipos de calorímetros isotérmicos de titulação, o sinal associado ao efeito térmico transitório de uma reacção/interacção entre os dois reagentes, sejam por exemplo ligando e biopolímero, apresenta um pico com a forma característica da resposta de um sistema de segunda ordem a um pulso de potência de curta duração (Figura 6). A energia calorífica associada obtém-se através da área delimitada pelo pico e a

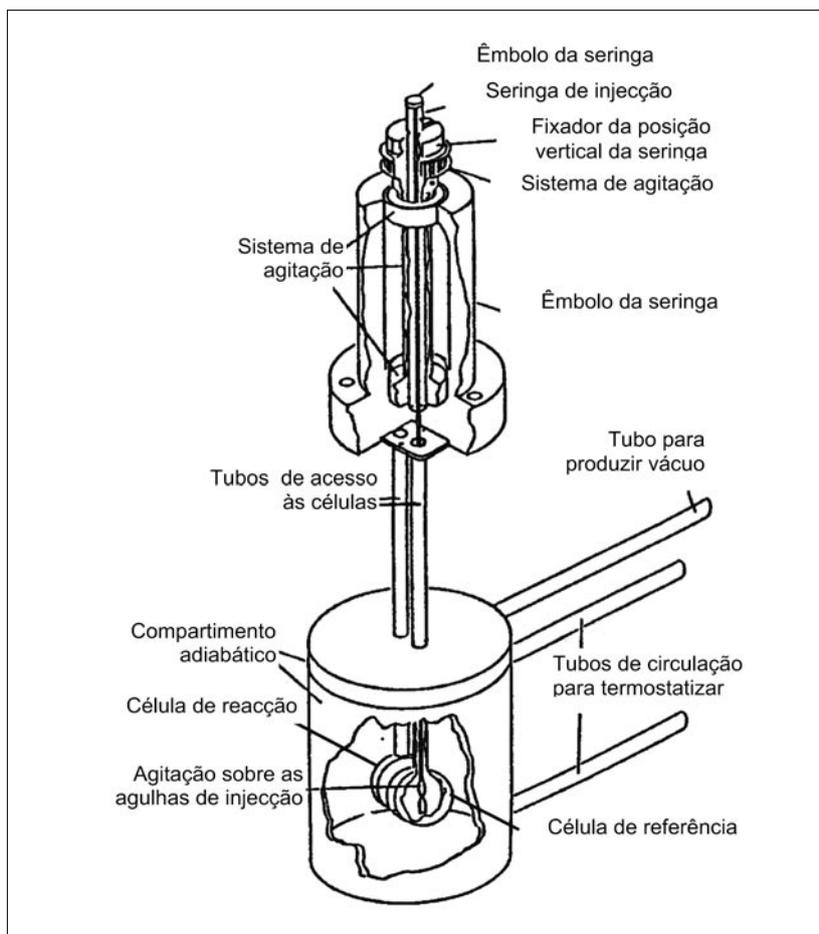


Figura 5 Esquema das células calorimétricas, cilindro adiabático e do conjunto injector/agitador de um calorímetro de titulação baseado no princípio de medida por compensação do efeito térmico num compartimento adiabático (adaptado de [6]).

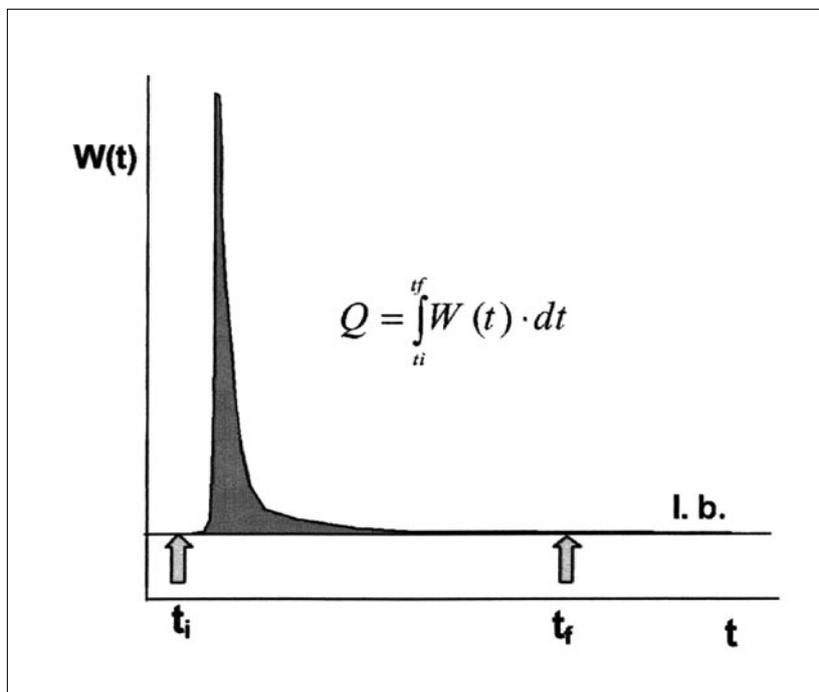


Figura 6 Pico característico de resposta a uma injeção de um reagente (ligando) sobre outro que se encontra na célula reaccional (biopolímero). A energia calorífica gerada na reacção é obtida por integração da função $W(t)$ sobre a linha de base, l.b. (adaptado de [6]).

linha de base interpolada entre o sinal estacionário antes e após injeção.

Conclusões

Actualmente, devido ao facto de poder ser utilizado na concepção de aplicações biomédicas inovadoras e na obtenção de moléculas modificadas para aplicação industrial, o conhecimento da estrutura dos polímeros biológicos reveste-se de particular importância. A versatilidade das técnicas calorimétricas actuais, capazes de detectar ínfimas variações de energia calorífica associadas a alterações das propriedades físicas e/ou reactividade das macromoléculas biológicas, contribui de forma inequívoca para uma melhor compreensão das macromoléculas e dos processos onde intervêm.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Prof. Manuel Minas da Piedade pela leitura atenta do manuscrito e pelas sugestões propostas. M. H. Casimiro agradece uma bolsa da Fundação para a Ciência e Tecnologia no âmbito do III Quadro Comunitário de Apoio (bolsa SFRH/BD/2862/2000).

Bibliografia

1. T. Hatakeyama, F.X. Quinn, *Thermal analysis – Fundamentals and applications to polymer science*, John Wiley & Sons, Ltd, New York, 1994.
2. H. Willard, L.Jr. Merrit, J. Dean, *Análise Instrumental*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1979.
3. DuPont Instruments, *Differential scanning calorimetry – DSC 910 Operator's manual*, Wilmington, 1990.
4. G. Höhne, W. Hemminger, H.-J. Flammer-shiem., *Differential Scanning Calorimetry – An Introduction for Practitioners*, Springer Verlag, Berlin, 1996.
5. C. A. Nieto de Castro, M. J. V. Lourenço, M. B. O. Sampaio, "Calibration of a DSC: its importance for the traceability and uncertainty of thermal measurements" *Thermo-chimica Acta*, 347 (2000) 85-91
6. O.L. Mayorga, *Curso de Doctorado de Microcalorimetria*, Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 2000.

LIDER MUNDIAL EM REOLOGIA

A TA INSTRUMENTS é líder mundial em reologia com uma focagem sem paralelo na indústria e investigação.

O compromisso com a inovação é comprovado; o desejo de fazer medidas reológicas melhor do que os seus concorrentes comprova-se pelos contínuos avanços nos seus diferentes produtos. A aquisição da firma Rheometrics permite a oferta de todos os tipos de sistemas existentes no mercado, desde sistemas operando a tensão controlada como sistemas operando a deslocamento controlado. O modelo AR 2000 é o equipamento mais vendido no mercado. Esta unidade possui capacidades de medição sem comparação e um conjunto de acessórios único. Entre outras, podem citar-se:

- Motor de arrastamento, modelado permitindo uma vasta gama linear de torções
- Inércia de baixo valor para o melhor controle de tensão e deslocamento
- Controle directo da tensão e oscilação em toda a gama de trabalho do equipamento
- Desenho ultra robusto do corpo do equipamento
- Transdutor de força manual separado
- Electrónica isolada do resto do equipamento
- Sistemas periféricos de troca rápida e identificação automática (Smart Swap)
- Representação em tempo real da forma de onda em oscilação
- O único sistema de tensão controlada disponível num corpo único de alumínio



UM NÍVEL SUPERIOR EM CALORIMETRIA

A TA Instruments fabrica diversos tipos de equipamentos na área da calorimetria. Para além dos calorímetros de varrimento, fornece também equipamento de análise termogravimétrica, equipamentos combinados de DSC/TG, DMA e TMA. O DMA Q800 é o estado da arte em análise dinâmico/mecânica.

A unidade utiliza uma tecnologia semelhante à dos reómetros, de atrito reduzido. O deslocamento é medido utilizando um decodificador óptico que proporciona elevada sensibilidade e resolução. A unidade é utilizada na caracterização de propriedades viscoelásticas de vários tipos de materiais sólidos e é ideal para aplicações em materiais de forte resistência incluindo compósitos.



TECNOLOGIA T₀ PARA CALORIMETRIA DIFERENCIAL DE VARRIMENTO (DSC)

Um desenho superior para desempenhos de alto nível. O novo sensor T₀ melhora a resolução em 300% comparativamente aos sistemas tradicionais.

A estabilidade da linha de base e a sensibilidade melhoram de uma ordem de magnitude em relação também aqueles sistemas.

A possibilidade de automação dá ao utilizador resultados rápidos, reprodutíveis e exactos.

A utilização do chamado DSC modulado, torna a análise dos dados, ainda mais simples, trazendo mais luz à análise de alguns eventos de difícil interpretação.



TA INSTRUMENTS

ELNOR – Equipamentos Técnicos e de Laboratório, S.A.

B R.D.Frei Jerónimo de Brito e Melo Nº 835 • 4465-642 LEÇA DO BALIO • PORTUGAL

✉ P.O.Box 1019 • 4470 MAIA CODEX • PORTUGAL

• Phone: (351 22) 90 50 400

• Fax : (351 22) 90 50 499

Haloperoxidasas de vanádio – enzimas muito versáteis

FILIPE ANDRÉ NATÁLIO¹, MARISA NICOLAI¹,
MARISE ALMEIDA^{1,2}, MADALENA HUMANES¹

Resumo

Haloperoxidasas de vanádio (V-HPO) são enzimas que catalisam uma diversidade substancial de reacções, desde a halogenação à sulfoxidação, sendo operacionais numa gama alargada de temperaturas e em misturas solvente orgânico-água. Na sua forma apo apresentam actividade de fosfatases. A inversa é, nalguns casos, verdadeira

– certos fosfatases, quando incubados com vanadato, apresentam actividade halogenante e/ou sulfoxidante. Embora o grau de homologia global existente entre os vários enzimas não seja muito elevado, a excepção é o centro activo cuja semelhança é muito grande. A reactividade destes enzimas é discutida com base em dados estruturais e em dados de mutações, efectuadas nos centros activos e nas suas vizinhanças.

Introdução

Haloperoxidasas são enzimas produzidos por muitos sistemas biológicos que catalisam a oxidação de halogenetos (cloreto, brometo e iodeto) pelo peróxido de hidrogénio.

Na alga *Penicillus capitatus* foi encontrado o primeiro haloperoxidase de que há registo para o meio marinho, verificando tratar-se de um enzima hémico [1]. Mas, outros haloperoxidasas tinham sido já descobertos, como por exemplo, no fungo *Caldariomyces fumago* [2], nos leucócitos [3], nos eosinófilos [4] e no leite [5].

Durante muito tempo pensou-se que todos os haloperoxidasas eram enzimas hémicos [6] mas, no início dos anos 80, foi descoberto o primeiro haloperoxidase de vanádio na alga castanha *Ascophyllum nodosum* [7]. Seguidamente, foi demonstrado que o vanádio se encontrava no grupo prostético dos haloperoxidasas de várias algas castanhas

[8-10]. Desde então a presença de haloperoxidasas de vanádio foi detectada em outros organismos como nas algas vermelhas, *Ceramium rubrum* [11], *Corallina pilulifera* [12] e em fungos terrestres como *Curvularia inaequalis* [13].

Na costa portuguesa várias espécies de algas da ordem Laminariales, (*Saccorhiza polyschides*, *Phyllariopsis brevipes*, *Laminaria saccharina*, *Laminaria hyperborea*, *Laminaria ochroleuca*) e da ordem Fucales (*Pelvetia canaliculata*, *A. nodosum*) apresentam haloperoxidasas de vanádio [14-17].

Os haloperoxidasas de vanádio apresentam-se frequentemente como agregados de monómeros de massa molecular 65-70 kDa [13] ou em estruturas homo-diméricas, como o haloperoxidase de vanádio da *A. nodosum*, em que a massa molecular é cerca de 120 kDa [18] ou ainda em estruturas dodecaméricas de iguais subunidades, como é o caso do haloperoxidase da *C. officinalis* [19].

Uma característica interessante destes enzimas é a sua notável estabilidade operacional. Estes enzimas podem reter a sua actividade, durante cerca de um mês, quando armazenados em 60% de metanol, etanol e isopropanol e permanecem totalmente activos quando expostos a temperaturas até 70 °C por períodos de tempo relativamente longos [8, 20]. No nosso laboratório observámos que estes enzimas, quando liofilizados, permaneceram mais de 6 meses, à temperatura ambiente, sem perda de actividade.

Os haloperoxidasas podem distinguir-se, com base no seu grupo prostético, em haloperoxidasas hémicos, que contêm o ferro ligado a uma protoporfirina IX ou derivado e os haloperoxidasas não hémicos onde se incluem os haloperoxidasas de vanádio [21]. Uma propriedade geral dos haloperoxidasas de vanádio é o facto de o vanádio, na forma de oxoanião, poder ser removido por diálise contra EDTA, em tampão citrato-fosfato a

1-Centro de Química e Bioquímica - Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Edifício C8, Campo Grande, 1749-016 Lisboa, Portugal

2-Instituto de Tecnologia Biomédica, Faculdade de Medicina Dentária da Universidade de Lisboa, 1649-003 Lisboa, Portugal

baixo pH (3,8), levando à inactivação do enzima. A actividade enzimática pode, contudo, ser completamente restabelecida por adição de vanadato [22].

Os haloperoxidasas de vanádio podem ser também classificadas segundo o halogeneto mais electronegativo que são capazes de oxidar. Assim, um cloroperoxidase pode oxidar cloreto, brometo e iodeto, enquanto que um bromoperoxidase pode oxidar brometo ou iodeto e um iodoperoxidase pode oxidar apenas o iodeto, embora a distinção entre estas subclasses não seja, por vezes, muito clara.

Estrutura dos haloperoxidasas de vanádio

Até ao momento foram publicadas as estruturas de raios-X de apenas três haloperoxidasas contendo vanádio.

Bromoperoxidase de vanádio (V-BPO) da alga *A. nodosum*

As estruturas primária e tridimensional do V-BPO (EC 1.1.11.X) extraído da alga *A. nodosum* revelaram tratar-se de uma proteína homo-dimérica com 1111 aminoácidos de forma aproximadamente elipsoidal. Os dois monómeros estão ligados por duas pontes dissulfureto intermoleculares. A sequência primária (SwissProt access code 1Q19) do V-BPO foi estabelecida combinando os resultados de sequenciação de DNA e de proteína com a interpretação dos mapas de densidade electrónica. O holoenzima contém um átomo de vanádio, numa estrutura de bipirâmide trigonal, em cada um dos dois centros activos (Figura 1) [23].

No estado nativo o átomo de vanádio encontra-se no centro de uma bipirâmide trigonal, com três átomos de oxigénio coordenados no plano equatorial; as cargas negativas destes átomos de oxigénio são compensadas por ligações de hidrogénio a vários aminoácidos da vizinhança, positivamente carregados e com carácter hidrofílico, os quais incluem Lys³⁴¹, Arg³⁴⁹, Ser⁴¹⁶, Gly⁴⁷¹ e Arg⁴⁸⁰. O oxigénio axial forma uma ligação de hidrogénio com o átomo N^{δ1} da histidina distal His⁴¹⁸ e uma ligação covalente com o átomo N^{δ2} da His⁴⁸⁶.

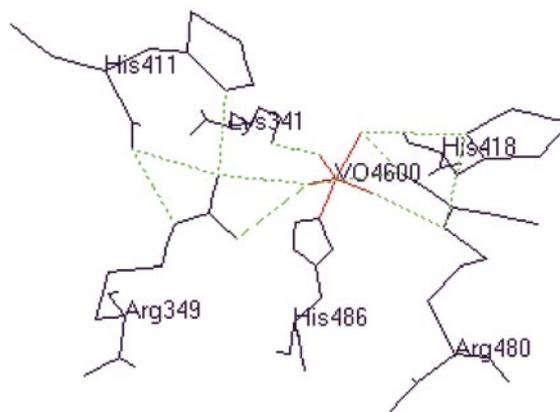


Figura 1 Estrutura do centro activo do bromoperoxidase de vanádio (V-BPO) da alga *A. nodosum* [23]. Linhas verdes a tracejado indicam ligações de hidrogénio. A figura foi preparada e modelada utilizando o programa Swiss PDB Viewer®.

Estes resultados estão em concordância com os dados espectroscópicos e cinéticos que estabelecem a presença de um resíduo de histidina no centro activo do V-BPO [24].

A estrutura do V-BPO tem ainda uma segunda histidina próxima do centro activo (His⁴¹¹) a qual, através de reacções de protonação/desprotonação modifica as propriedades catalíticas do enzima.

Locais de ligação específica para substratos orgânicos aromáticos (como o indole ou monoclorodimedona, por exemplo) ou para halogenetos, não são visíveis nesta estrutura.

Cloroperoxidase de vanádio (V-CPO) do fungo *C. inaequalis*

O gene que codifica o V-CPO de *C. inaequalis* foi sequenciado, correspondendo a uma proteína de 609 aminoácidos. Tanto a estrutura primária [25] como a estrutura de raios-X do V-CPO de *C. inaequalis* foram determinadas [26].

A forma global deste V-CPO monomérico é cilíndrica. O empacotamento compacto das hélices resulta num efeito hidrofóbico que é, provavelmente, o maior responsável pela estabilidade deste enzima.

Da estrutura cristalina da cloroperoxidase de *C. inaequalis* [26] verifica-se que o

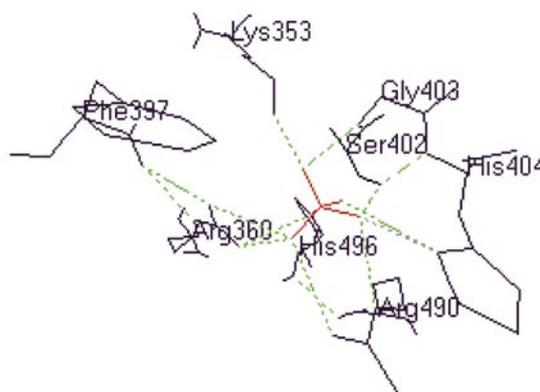


Figura 2 Representação esquemática do centro activo do cloroperoxidase de vanádio (V-CPO) do fungo *C. inaequalis* [30]. Linhas verdes a tracejado indicam ligações de hidrogénio. A figura foi preparada e modelada utilizando o programa Swiss PDB Viewer®.

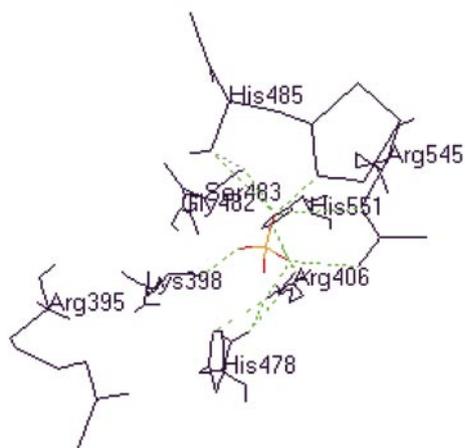


Figura 3 Estrutura do centro activo de uma das subunidades do bromoperoxidase de vanádio (V-BPO) da alga *C. officinalis* [23]. Linhas a verde e a tracejado indicam ligações de hidrogénio. A figura foi preparada e modelada utilizando o programa Swiss PDB Viewer®.

ião vanadato está ligado covalentemente ao átomo $N^{\delta 2}$ da histidina proximal (His^{496}), na posição apical, formando uma estrutura de bipirâmide trigonal. A carga negativa dos átomos de oxigénio é compensada, também aqui, pelos resíduos de carga positiva dos aminoácidos da vizinhança, que incluem Lys^{353} , Arg^{360} , Ser^{402} , Gly^{403} e Arg^{490} (Fig. 2).

O quarto oxigénio situa-se no vértice superior da pirâmide, na forma de grupo hidroxilo, o qual forma uma ligação de hidrogénio com o átomo de azoto $N^{\delta 1}$ da His^{404} distal.

Bromoperoxidase de vanádio da alga *C. officinalis*

O bromoperoxidase da alga *C. officinalis* apresenta-se numa forma dodecamérica, com doze subunidades idênticas, num arranjo invulgar de simetria, com uma cavidade central formada pelos átomos de azoto terminais de cada subunidade [27]. A estrutura do centro activo de cada subunidade encontra-se na Figura 3. As subunidades, por sua vez, interactivam duas a duas, com um enrolamento e uma organização semelhantes aos dímeros do enzima da alga *A. nodosum*, com o qual tem cerca de 33% de homologia.

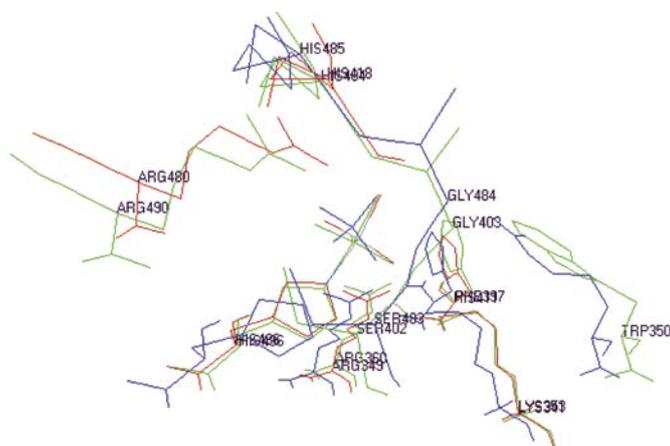


Figura 4 Sobreposição da estrutura dos centros activos dos três haloperoxidasas de vanádio: Verde – *C. inaequalis*; Vermelho – *A. nodosum*; Azul – *C. officinalis*. A figura foi preparada e modelada utilizando o programa Swiss PDB Viewer®.

Comparação do centro activo das haloperoxidasas vanádio – aproximação catalítica

Embora a comparação das estruturas tridimensionais do V-CPO do fungo *C. inaequalis* e das V-BPO das algas *A. nodosum* e *C. officinalis* (Figura 4), revele que os centros activos são estruturalmente idênticos, a homologia entre as sequências dos VBPO e do V-CPO é baixa (aproximadamente 21.5%).

Na estrutura do centro activo do V-BPO da *A. nodosum*, o resíduo catalítico His^{418} corresponde à His^{404} no V-CPO. Uma segunda histidina (His^{411}), próxima do centro activo do V-BPO da *A. nodosum* pode alterar o potencial redox do intermediário peroxo, por reacções de protonação/desprotonação. Este resíduo (His^{411}) está também envolvido na estabilização dos átomos de oxigénio do grupo prostético, mas não se encontra no V-CPO. Por outro lado, o aminoácido Phe^{397} encontra-se exclusivamente no V-CPO. Colocou-se a hipótese, de que esta diferença nos aminoácidos, possa ser responsável pela diferença na actividade de oxidação observada [28], uma vez que as cadeias laterais hidrofóbicas de Trp^{350} e Phe^{397} no V-CPO podem fornecer um ambiente estabilizador dos halogenetos e actuar como um ponto de ancoragem para estes. Também o resíduo Ser^{402} , presente exclusivamente no V-CPO da *C. inaequalis*, na proximidade do grupo prostético, é um candidato provável para este efeito.

Nas três estruturas cristalográficas de V-HPO publicadas, todos os resíduos envolvidos na ligação ao vanadato se mantêm, mas apenas cinco dos 17 resíduos que delimitam a cavidade do centro activo são mantidos entre os dois V-BPO e nenhum destes cinco resíduos se encontra estruturalmente conservado no V-CPO. Nos V-BPO existe uma His^{478} que está localizada na posição da Phe^{397} que é proposta para a ligação do cloreto ao centro activo da V-CPO. Esta substituição, em conjunto com a ligação de hidrogénio da Asp^{333} (Asp^{270}) à His^{485} (His^{418}) constitui a base da explicação para a preferência do brometo face ao cloreto. Na verdade, estes dois resíduos estão conservados nas V-BPO.

Os resíduos envolvidos na ligação do vanadato estão conservados nestes três haloperoxidasas. Contudo, a maioria dos outros resíduos que formam a cavidade do centro activo são diferentes, o que se pode traduzir em diferenças de especificidade de substratos e estereoselectividade das reacções catalisadas por estes enzimas.

Relação evolutiva entre V-HPO e fosfatases

Apesar da homologia entre o V-BPO de *A. nodosum* e o V-CPO de *C. inaequalis* ser muito baixa, há alguns resíduos, em três domínios específicos, que são também conservados em pelo menos duas classes de fosfatases: os fosfatases de membrana e os fosfatases ácidos segregados [29].

A estrutura cristalina e as sequências primárias do fosfatase ácido não específico de *Escherichia blattae* [30] e do V-CPO de *C. inaequalis* [25] mostram uma grande similaridade nos centros activos, pondo a hipótese de os haloperoxidasas de vanádio e as várias classes de fosfatases ácidos terem evoluído de um mesmo antecedente [29]. Foi surpreendente descobrir que a forma apo do cloroperoxidase de vanádio apresenta actividade catalítica como fosfatase, mediando a hidrólise do *p*-nitrofenilfosfato [29]. Os dados cinéticos da reacção de fosfatase catalizada pelo apocloroperoxidase de vanádio apontam para um mecanismo com a formação de um intermediário enzimático fosforilado. É importante salientar que os fosfatases ácidos, com um grau de homologia elevado com o V-CPO de *C. inaequalis*, nos quais foi incorporado vanadato, revelam actividade de oxidação do brometo e promovem reacções enantio-selectivas de transferência de oxigénio, com bons rendimentos [31, 32]. Curiosamente, a incorporação de vanadato num fitase extraída do *Aspergillus ficuum* e num fosfatase ácido extraído do germén de trigo, não homólogos ao V-HPO, permitem a estes enzimas catalisarem reacções de transferência enantio-selectiva de oxigénio [33].

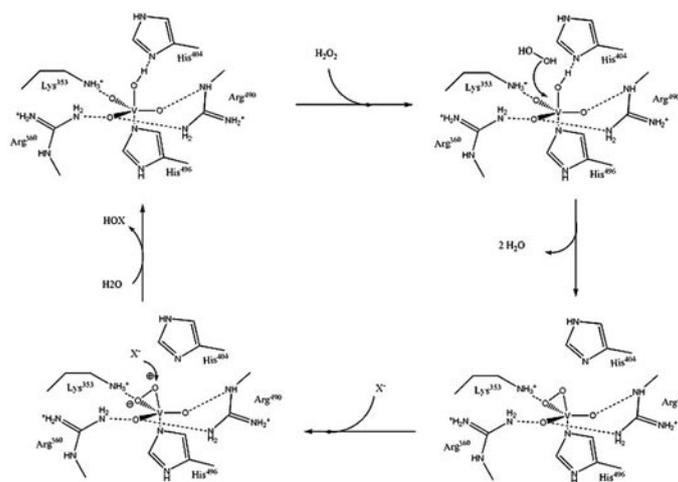
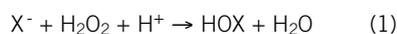


Figura 5 Esquema básico do mecanismo de oxidação do halogeneto por acção do cloroperoxidase de vanádio do fungo *C. inaequalis* [39].

Aspectos mecanísticos das reacções de halogenação

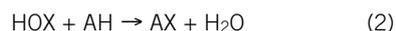
Mecanismo catalítico geral das haloperoxidasas

Os haloperoxidasas são enzimas que oxidam halogenetos a ácidos hipohalosos, à custa do peróxido de hidrogénio (ou outro peróxido):

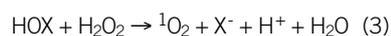


em que X⁻ = Cl⁻, Br⁻, I⁻ (ou o pseudo halogeneto SCN⁻) [34].

Na presença do peróxido de hidrogénio, através de uma transferência de dois electrões, produz-se o intermediário ácido hipohaloso, muito reactivo e que pode prosseguir a reacção, se estiver presente um aceitador nucleófilo (HA), para formar um vasto leque de compostos halogenados, como se esquematiza na seguinte reacção:



Na ausência de um composto aceitador (HA), verifica-se um processo designado por disproporção assistida por halogeneto – o ácido hipohaloso pode ser reduzido por um equivalente adicional de peróxido de hidrogénio, produzindo-se oxigénio molecular singlete [35, 36]



Apesar da diversidade de produtos halogenados formados, apenas três classes de enzimas halogenantes (haloperoxidasas, halogenases dependentes de FAD₂ e metilo-transferases) parecem estar envolvidos na biossíntese de compostos orgânicos halogenados [37]. Pensa-se que a secreção destes metabolitos halogenados, que exibem muitas vezes uma actividade biológica considerável, pode estar ligada, directa ou indirectamente, aos mecanismos de defesa dos organismos [38].

O mecanismo proposto para a actualização catalítica dos haloperoxidasas de vanádio é um mecanismo do tipo *ping-pong* [35, 36], onde o primeiro substrato (H₂O₂) se liga ao enzima, formando o peroxocomplexo com libertação do primeiro produto (H₂O), antes da ligação e oxidação do segundo substrato (X⁻ = halogeneto). Embora os parâmetros cinéticos sejam diferentes, os estudos cinéticos com os vários enzimas parecem apontar para um mecanismo semelhante nas reacções de oxidação do halogeneto (cloreto e brometo) catalisadas pelas cloro- e bromoperoxidasas de vanádio (Figura 5).

Ciclo catalítico

Uma característica interessante destes enzimas é o facto do estado de oxidação do vanádio se manter inalterado duran-

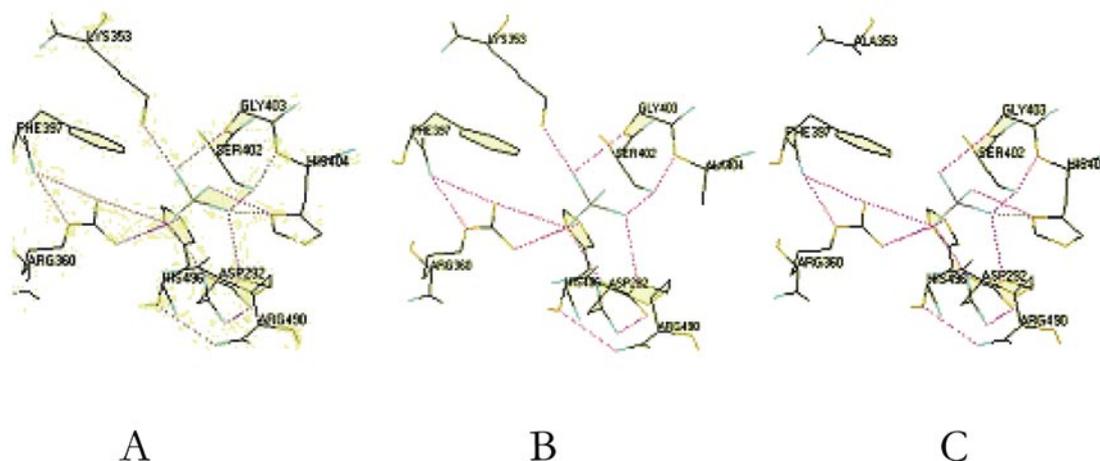


Figura 6 Comparação de algumas estrutura do centro activo: (A) cloroperoxidase de vanádio de *C. inaequalis*, (B) mutante V-CPO His⁴⁰⁴Ala e (C) mutante Lys³⁵³Ala. Linhas verdes a tracejado indicam ligações de hidrogénio. A figura foi preparada e modelada utilizando Swiss PDB Viewer[®].

te todo o ciclo catalítico, ao contrário do que se verifica nas haloperoxidasas hémicas.

Durante o ciclo catalítico e para o caso do V-CPO do *C. inaequalis*, o grupo prostético (HVO_4^{3-}) está coordenado ao átomo $\text{N}^{\delta 2}$ da His⁴⁹⁶. O peróxido liga-se, através dos dois átomos de oxigénio, ao átomo de vanádio. Assim, a geometria de coordenação em torno do átomo de vanádio passa a apresentar-se como uma pirâmide tetragonal distorcida. Inicialmente, foi proposto que o ião halogeneto se ligaria directamente ao vanadato; todavia o isolamento de um intermediário peroxo, aliado ao facto de que a ligação halogeneto-vanadato baixaria a sua nucleofilicidade, o que não se verifica, inviabilizaram esta hipótese [39].

As estruturas cristalinas, quer do enzima nativo quer do intermediário peroxo, no V-CPO, permitiram observar que o resíduo de aminoácido Lys³⁵³ está ligado por uma ponte de hidrogénio ao oxigénio do grupo prostético. Esta interacção parece ser muito importante para a coordenação do peróxido ao vanádio (V), labilizando um oxigénio equatorial do grupo prostético, facilitando, concomitantemente, o ataque nucleofílico do halogeneto, por polarização do peróxido coordenado [35, 36].

No V-BPO, o aminoácido correspondente (Lys³⁴¹) e o aminoácido adicional His⁴¹¹ podem estar envolvidos na ligação do peróxido ao vanádio e também na activação do peróxido coordenado [37].

Mutagénesis do V-CPO: uma aproximação ao mecanismo catalítico

Afim de investigar a função específica dos aminoácidos do centro activo na actividade catalítica do V-CPO do fungo *C. inaequalis*, o enzima foi expresso através de um sistema heterólogo, na levedura *Saccharomyces cerevisiae* tendo sido produzidos mutantes, através de mutagénesis dirigida [39, 40]. O cloroperoxidase de vanádio recombinante (rv-CPO) é reactivado por adição de vanadato e, quando comparado com o produzido naturalmente, apresenta um comportamento cinético semelhante. A estrutura cristalina mostra que a estrutura global do enzima permanece praticamente inalterada, particularmente, na vizinhança do centro activo [39].

Foram efectuadas experiências de mutagénesis dirigida sobre diversos resíduos do centro activo, mutando-os para alaninas. Nesta cavidade, existe um grande número de interacções, essencialmente ligações de hidrogénio, que envolvem as cadeias laterais dos aminoácidos que a revestem. A substituição de resíduos de aminoácidos, com cadeias laterais gran-

des, por grupos metilo de uma alanina, não parece provocar mudanças estruturais no local de ligação do vanádio, com excepção do mutante His⁴⁰⁴Ala que sofre algumas modificações estruturais (Fig. 6).

Demonstraram-se alguns efeitos estruturais, não muito significativos, nas mutações do resíduo Arg³⁶⁰, que está directamente envolvido na compensação da carga negativa de um dos oxigénios do vanadato, e também no resíduo Asp²⁹², que está envolvido na formação de uma ponte salina com o aminoácido Arg⁴⁹⁰ e que, por sua vez, também interacciona com o grupo prostético. Contudo, é relevante salientar que se verifica uma diminuição da actividade como haloperoxidase devido, provavelmente, à destabilização da rede de interacções existentes na cavidade e que contribuem para a formação do peroxocomplexo.

O enzima perde igualmente a sua capacidade de oxidar o cloreto quando a His⁴⁰⁴ distal é substituída por uma alanina (mutante His⁴⁰⁴Ala), mostrando assim que este resíduo desempenha um papel importante na estabilização do grupo hidroxilo apical [23].

No mutante His⁴⁹⁶Ala, apesar de não se verificarem modificações estruturais, esta alteração resulta num enzima inactivo, devido à falta de capacidade do

enzima ligar, neste caso, o grupo prostético, demonstrando assim a importância essencial da ligação do vanadato ao átomo N^{δ2} da His⁴⁹⁶.

Recentemente foram efectuados outros estudos utilizando mutagénese dirigida nos aminoácidos do centro activo Ser⁴⁰² e Phe³⁹⁷ do cloroperoxidase da *C. inaequalis*.

Coloca-se então a hipótese de que estes aminoácidos possam marcar a diferença entre a capacidade oxidativa de halogenetos entre o V-BPO de *A. nodosum* e o V-CPO de *C. inaequalis*. A substituição de Phe³⁹⁷ por uma histidina no V-CPO, utilizando a mutagénese dirigida, mostra que a actividade de cloração se mantém, embora diminuída. Apesar disso, este mutante ainda apresenta maior actividade de bromação do que o V-BPO de *A. nodosum* [41].

Por outro lado, estudos de EXAFS no V-BPO sugerem que o resíduo Ser⁴⁰² pode ter um papel importante na catálise, ligando o halogeneto, de forma covalente, ao grupo hidroxilo do aminoácido [42]. No entanto, resultados recentes demonstram que a mutação da Ser⁴⁰² do V-CPO tem um efeito diminuto na actividade catalítica (resultados não publicados). A estrutura dos mutantes demonstra que o centro activo deste cloroperoxidase é uma matriz rígida, que fornece um local de ligação a um oxoanião. Embora a

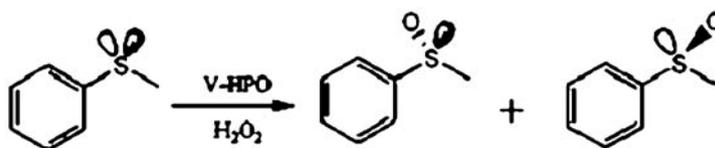


Figura 7 Reacção de transferência de oxigénio em sulfuretos, catalisada pelo V-HPO. Imagem concebida utilizando o programa ChemUltra 9.0®.

capacidade de oxidação do cloreto ou brometo não possa ser especificamente atribuída a um resíduo aminoácido ela é, muito provavelmente, determinada por uma relação sinérgica entre vários resíduos e não por um só.

Reacções de sulfoxidação

A adição de um átomo de oxigénio a um centro de enxofre, dentro de um composto orgânico formando uma ligação polarizada S-O, não só altera as propriedades físicas e químicas da molécula, mas pode também alterar profundamente a actividade biológica, a sua distribuição dentro do organismo e a sua forma de degradação.

Os sulfóxidos opticamente activos, são bastante conhecidos como ferramentas na síntese orgânica, devido à sua elevada indução assimétrica, o que pode ser atribuído a diferenças espaciais e estéreas entre os substituintes e a esta-

bilidade conformacional dos sulfuretos [43-49].

A utilização de peroxocomplexos de vanádio (V) em reacções de oxidação tem sido investigada desde há várias décadas. Em 1986, foi sintetizado um peroxocomplexo, usando uma base de Schiff tridentada e opticamente activa, o qual catalisou a oxidação de um sulfureto de metilfenilo pelo hidroperóxido de *t*-butilo em diclorometano, conduzindo à formação do enantiómero R do correspondente sulfureto, com um excesso enantiomérico de 14% [50]. Desde então, muitas outras reacções de oxidação, catalisadas por peroxocomplexos de vanádio (V), têm sido descritas [49-54].

O cloroperoxidase do fungo *C. fumago*, um haloperoxidase hémico, é, até à data, o haloperoxidase que produz a mais elevada enantioselectividade entre todos os haloperoxidasas (hémico-

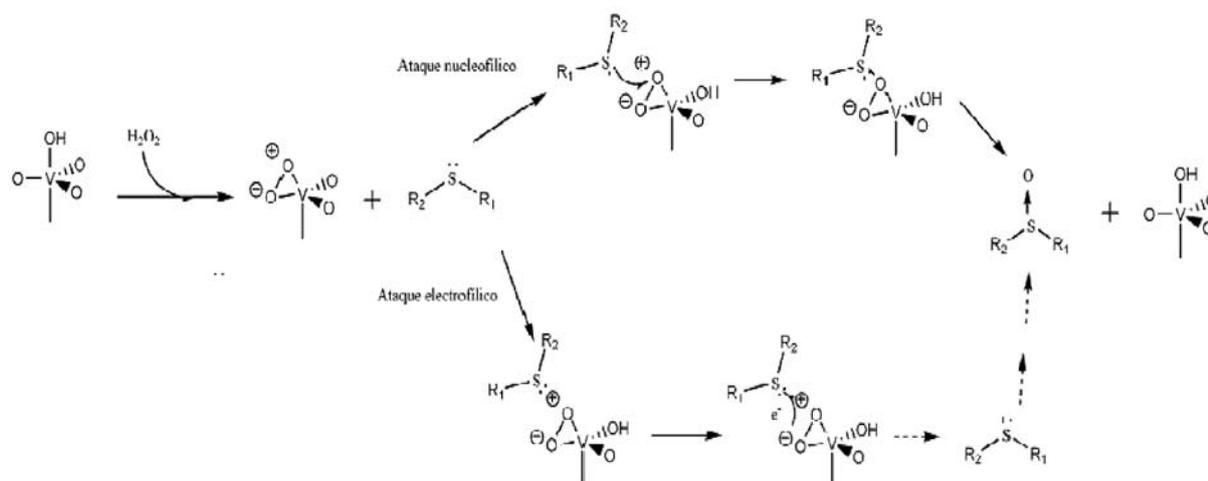


Figura 8 Proposta de possíveis mecanismos de transferência de oxigénio em peroxocomplexos de vanádio na presença de sulfuretos. R1 e R2 descrevem possíveis cadeias/grupos associadas ao átomo de enxofre. Imagem concebida utilizando o programa ChemUltra 9.0®.

cos e de vanádio) estudados até agora [32, 43, 44, 49, 55, 56].

Alguns autores, atribuem este facto, à presença de um resíduo do aminoácido

Foi já referida a relação evolucionária e semelhanças entre os centros activos dos fosfatases e haloperoxidasas de vanádio. Para o confirmar, a um fita-se extraído do *Aspergillus ficuum*, (não

gênio, que diminui consideravelmente o rendimento e o excesso enantiomérico dos sulfóxidos produzidos enzimaticamente [32, 48].

Mecanismo catalítico da transferência de oxigénio

Na sulfoxidação catalisada por peroxocomplexos inorgânicos de vanádio, a oxidação dos sulfuretos aos correspondentes sulfóxidos pode ser catalisada por um mecanismo de transferência de oxigénio que envolve um ataque electrofílico ou por um mecanismo de transferência de oxigénio nucleofílico (Figura 8) [57].

No mecanismo electrofílico, o processo de transferência de oxigénio envolve a transferência electrónica do peroxocomplexo de vanádio (V) activado, para um substrato electrofílico, sendo a reacção de oxidação mediada por um mecanismo radicalar [56, 58].

Na via nucleofílica, o substrato apresenta um comportamento nucleofílico, coordenando-se ao centro metálico, convertendo-o ao seu carácter original electrofílico, possibilitando o ataque nucleófilo pelo peróxido coordenado. Como os peroxocomplexos metálicos tendem a reagir através de um ataque nucleófilo, considerou-se que os sulfuretos se ligam ao peroxocomplexo de vanádio por um mecanismo de oxidação intramolecular, antes da transferência do oxigénio, favorecendo a via de transferência nucleofílica do oxigénio; no entanto, a coordenação do sulfureto parece pouco provável pois a sulfoxidação catalisada do vanádio (V) não é afectada pelo aumento da concentração do sulfureto ou por impedimentos estereoquímicos [32].

Reacções enzimáticas de transferência de oxigénio

A actuação dos enzimas é fortemente influenciada pela acessibilidade dos substratos ao centro activo e pela ocorrência de reacções não específicas de transferência electrónica, afectando deste modo a tão desejada enantioselectividade. A acessibilidade é regulada pela combinação de factores estéreos e electrónicos em consonância com a existência de factores de estabilização

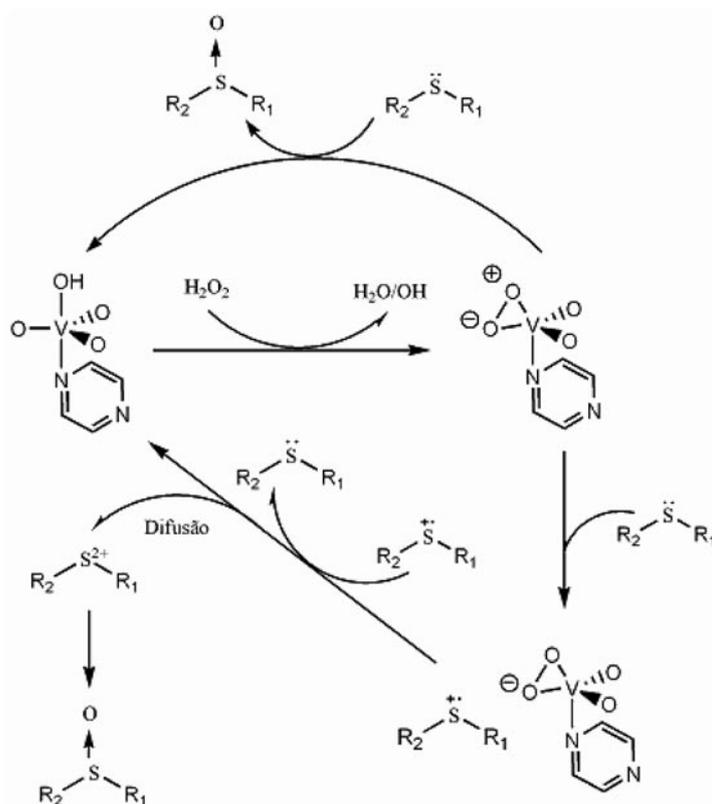


Figura 9 Ciclo catalítico da sulfoxidação catalisado pelas haloperoxidasas de vanádio. Imagem concebida utilizando o programa ChemUltra 9.0®.

glutamato, na posição distal, no lugar do resíduo de histidina, que se encontra na maioria dos haloperoxidasas, quer hémicos, quer de vanádio [44].

Ten Brink *et al.* demonstraram que o V-BPO extraída das algas *A. nodosum* e *C. pilulifera* e o V-CPO do fungo *C. inaequalis* catalisavam a sulfoxidação do *p*-metiltioanisole (Fig. 7) [32].

O V-BPO extraído da alga *A. nodosum* apresenta a maior taxa de enantioselectividade, produzindo o sulfóxido do tioanisole com um excesso enantiomérico de 91%. Todavia, e embora a taxa de conversão para o V-CPO do *C. inaequalis* seja superior, o produto obtido é racémico [32].

homólogo dos V-HPO), foi incorporado vanádio no centro activo; este novo enzima é capaz de catalisar a sulfoxidação do tioanisole, embora com rendimento moderado e excesso enantiomérico reduzido [33].

No entanto, é importante salientar que, apesar do interesse existente nestas reacções, há ainda alguns impedimentos que condicionam a sua utilização, como por exemplo, a velocidade de reacção da maioria dos sulfuretos, biologicamente importantes, ser lenta devido, provavelmente, à baixa solubilidade dos sulfuretos em água ou ainda a existência de oxidação espontânea (não enzimática) dos sulfuretos com o peróxido de hidro-

como, por exemplo, as pontes de hidrogénio entre os aminoácidos das cadeias laterais na vizinhança do centro activo e do oxoanião (VO_4^{3-}).

Os mecanismos envolvidos nestas reacções de transferência de oxigénio diferem no caso da reacção envolver haloperoxidases hémicos ou de vanádio [44, 56, 58, 59].

Em termos mecanísticos, o primeiro passo da transferência de oxigénio nos processos de sulfoxidação pode ser comparada à formação do ácido hipohaloso: o peróxido liga-se ao átomo de vanádio lateralmente no plano equatorial, formando o peroxocomplexo [28]. Um dos átomos de oxigénio do peroxocomplexo tem uma carga parcial positiva e é vulnerável a um ataque nucleofílico pelo sulfureto (ou pelo halogeneto). É no segundo passo da reacção que os mecanismos divergem (Figura 8).

Para comprovar este mecanismo, foram realizadas experiências de marcação radioactiva do oxigénio e verificou-se que o oxigénio incorporado no sulfóxido provém, essencialmente, de peróxido marcado $\text{H}_2^{18}\text{O}_2$ (95%), no caso do V-BPO de *A. nodosum*. A mesma experiência realizada com o cloroperoxidase de *C. inaequalis* demonstrou que o oxigénio incorporado provém da água (95%), o que parece confirmar que este cloroperoxidase tem características intermédias entre os haloperoxidases de vanádio e os haloperoxidases hémicos [56].

A oxidação de substratos, como halogenetos e sulfuretos, é descrita, para os haloperoxidases de vanádio, como um mecanismo de transferência de dois electrões enquanto que para os haloperoxidases hémicos a catálise da reacção de oxidação é feita através de um mecanismo monoeléctronico, em que o enzima, sob a forma de peroxocomplexo, retira um electrão ao sulfureto, oxidando-o e formando um sulfureto radicalar catiónico que é libertado para a solução (Figura 9).

A formação de um sulfureto radicalar foi já demonstrado para as reacções catalisadas por lactoperoxidase [33, 44].

Este radical difunde-se e reage com outras moléculas levando à formação de

Tabela I Reacções de sulfoxidação do tioanisole catalisadas por vários enzimas – excesso enantiomérico (ee) e rendimento.

Haloperoxidase	e.e. (%)	Rendimento
<i>Ascophyllum nodosum</i>	85 (R)	55
<i>Coralina officinalis</i>	91 (S)	84
<i>Coralina pilulifera</i>	55 (S)	18
<i>Caldariomyces fumago</i>	>99 (R)	99.5

uma mistura racémica que é independente da concentração do enzima e do substrato.

Este passo tem lugar fora do centro activo e esta molécula radicalar reage, de forma aleatória, ora com outra molécula idêntica ora com moléculas de solvente ou oxigénio.

Mas, é igualmente possível que duas moléculas de sulfureto radicalar catiónicas possam reagir entre si para formar um sulfureto dicatiónico e uma molécula de sulfureto, sendo a reacção entre o dicatiónio e o solvente, neste caso a água, bastante provável [56, 59].

Apesar da existência de um mecanismo para a reacção de transferência de oxigénio, ainda não há uma justificação plenamente aceite para o facto dos V-BPO das algas *A. nodosum* e *C. officinalis* catalisarem enantio-selectivamente a formação do enantiómero R (superior a 91% [32] e 95% [43], respectivamente), enquanto que o VBPO da *C. pilulifera* apenas apresenta um excesso enantiomérico de 55% do enantiómero S (Tabela I) [32].

Este facto poderá dever-se a um baixo turnover, que traz como consequência um aumento da reacção não enzimática entre o peróxido de hidrogénio e o sulfureto levando a uma diminuição considerável da enantio-selectividade.

Conclusão

Os haloperoxidases de vanádio são os catalisadores da oxidação de halogenetos mais eficientes até à data encontrados. O mecanismo de catálise envolve a formação prévia de um peroxocomplexo.

As reacções são fortemente influenciadas pelos resíduos de aminoácidos do centro activo, que é muito semelhante nas três estruturas de haloperoxidases nativos até agora conhecidos. No entanto, a sua reactividade para alguns substratos, nomeadamente nas reacções de transferência de oxigénio, pode ser muito diversa, o que indicia um papel importante dos aminoácidos menos próximos do centro activo.

A homologia entre centros activos de alguns fosfatases e haloperoxidases abre também algumas hipóteses interessantes, em termos de mecanismos de regulação e biogénese, sobretudo de produtos halogenados com proveniência marinha.

Finalmente, a grande estabilidade e a reactividade destes compostos torna-os óptimos candidatos a biocatalisadores, em várias áreas farmacêuticas, em medicina nuclear e em oncomedicina.

Bibliografia

1. J. A. Manthey e L. P. Hager, *Journal of Biological Chemistry* **256** (1981) 11232-11238.
2. P. F. Hallenberg e L. P. Hager, *Methods in Enzymology* **52** (1978) 521-529.
3. G. C. Mills, *Journal of Biological Chemistry* **229** (1957) 189-197.
4. R. Wever, M. N. Hamera, R. S. Weening e D. Roos, *European Journal of Biochemistry* **108** (1980) 491-495.
5. M. Morrison, H. B. Hamilton e E. Stotz, *Journal of Biological Chemistry* **228** (1957) 767-776.

6. S. Ohtaki, H. Nakagawa, M. Nakamura e I. Yamazaki, *Journal of Biological Chemistry* **260** (1985) 1387-1390.
7. H. Vilter, *Phytochemistry* **23** (1984) 1387-1390.
8. H. Plat, B. E. Krenne e R. Wever, *Biochemistry Journal* **248** (1987) 277-279.
9. E. De Boer, Y. Van Kooyk, M. G. M. Tromp, H. Plat e R. Wever, *Biochimica and Biophysica Acta* **869** (1986) 48-53.
10. B. E. Krenn, Y. Izumi, H. Yamada e R. Wever, *Biochimica and Biophysica Acta* **998** (1989) 63-68.
11. N. Itoh, Y. Izumi e H. Yamada, *Biochemistry Biophysics Research Communications* **131** (1985) 428-435.
12. N. Itoh, Y. Izumi e H. Yamada, *Journal of Biological Chemistry* **261** (1986) 5194-5200.
13. J. W. van Schijndel, E.G. Vollenbroek e R. Wever, *Biochimica and Biophysica Acta* **1161** (1993) 249-256.
14. M. Almeida, M. Humanes, J. A. Silva, R. Melo e J. J. R. Fraústo da Silva, 'Plant peroxidases: Biochemistry and physiology', em C. Obinger, U. Burner, R. Eberman, C. Penel, H. Greppin (eds), University of Geneva (1996) 146-152.
15. M. Almeida, M. Humanes, J. A. Silva, R. Melo, J. J. R. Fraústo da Silva, H. Vilter e R. Wever, *Phytochemistry* **48** (1998) 229-239.
16. G. Almeida, M. Humanes, J. A. Silva, R. Melo, J. J. R. Fraústo da Silva e R. Wever, *Phytochemistry* **54** (2000) 5-11.
17. M. Almeida, S. Filipe, M. Humanes, M. F. Maia, R. Melo, N. Severino, J. A. L. da Silva, J. J. R. Fraústo da Silva e R. Wever, *Phytochemistry* **57** (2001) 633-642
18. B. E. Krenn, H. Plat e R. Wever, *Biochimica and Biophysica Acta* **912** (1989) 287-291.
19. C. Rush, A. Willetts, G. Davies, Z. Dauter, H. Watson e J. Littlechild, *FEBS Letters* **359** (1995) 244-246.
20. E. De Boer, H. Plat, M. G. M. Tromp, R. Wever, M. C. R. Franssen, H. C. van der Plas, E. M. Meijer e H. E. Schoemaker, *Biotechnology and Bioengineering* **30** (1987) 607-610.
21. H. Vilter, *Biological Systems* **31** (1995) 325-362.
22. R. Wever, B. E. Krenn, E. De Boer, H. Offenberg e H. Plat, *Progress in Clinical Biological Research* **274** (1988) 477-493.
23. M. Weyand, H.-J. Hecht, M. Kieß, M.-F. Liaud, H. Vilter e D. Schomburg, *Journal of Molecular Biology* **293** (1999) 595-611.
24. J. M. Arber, E. de Boer, C. D. Garner, S. S. Hasnain e R. Wever, *Biochemistry* **28** (1989) 7968-7973.
25. L. H. Simons, P. Barnett, E. G. M. Vollenbroek, H. L. Dekker, A. O. Muijers, A. Messerschmidt e R. Wever, *European Journal of Biochemistry* **229** (1995) 566-574.
26. A. Messerschmidt e R. Wever, *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* **93** (1996) 392-396.
27. M. N. Isupov, A. R. Dalby, A. A. Brindley, Y. Izumi, T. Tanabe, G. N. Murshudov e J. A. Littlechild, *Journal of Molecular Biology* **299** (2000) 1035-1049.
28. S. Macedo-Ribeiro, W. Hemrika, R. Renirie, R. Wever e A. Messerschmidt, *Journal of Biological Inorganic Chemistry* **4** (1999) 209-219.
29. W. Hemrika, R. Renirie, H. L. Dekker, P. Barnett e R. Wever, *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* **94** (1997) 2145-2149.
30. K. Ishikawa, Y. Mihara, K. Gondoh, E. Suzuki e Y. Asano, *EMBO Journal* **19** (2000) 2412-2423.
31. N. Tanaka, V. Dumay, Q. Liao, A. J. Lange e R. Wever, *European Journal of Biochemistry* **269** (2002) 2162-2167.
32. H. B. Ten Brink, A. Tuynman, H. L. Dekker, W. Hemrika, Y. Izumi, T. Oshiro, H. E. Schoemaker e R. Wever, *Inorganic Chemistry* **37** (1998) 6780-6784.
33. F. Van de Velde, L. Konemann, F. Van Rantwijk e R. A. Sheldon, *Biotechnology and Bioengineering* **67** (2000) 87-96.
34. S. L. Neidleman e J. Geigert, *Biohalogenation: Principles, Basic Rules and Applications*, Ellis Horwood Limited, John Wiley & Sons, New York, 1986.
35. R. R. Everett, H. S. Soedjak e A. Butler, *Journal of Biological Chemistry* **265** (1990) 15671- 15679.
36. H. S. Soedjak, J. V. Walker e A. Butler, *Biochimica and Biophysica Acta* **1079** (1991) 1-7.
37. M. C. R. Franssen, *Biocatalysis* **10** (1994) 87-111.
38. A. Butler e J. N. Carter-Franklin, *Natural Product Reports* **21** (2004) 180-188.
39. W. Hemrika, R. Renirie, S. Macedo-Ribeiro, A. Messerschmidt e R. Wever, *Journal of Biological Chemistry* **274** (1999) 23820-23827.
40. R. Renirie, W. Hemrika e R. Wever, *Journal of Biological Chemistry* **275** (2000) 11650- 11657.
41. M. Weyand, H. -J. Hecht, M. Kie, M. F. Liaud, H. Vilter e D. Schoumbourg, *Journal of Molecular Biology* **293** (1999) 595-611.
42. H. Dau, J. Dittmer, M. Epple, J. Hanss, E. Kiss, D. Redher, C. Schulzke e H. Vilter, *FEBS Letters* **457**(1999) 237-240.
43. M. Andersson, A. Willetts, S. Allenmark, *Journal of Organic Chemistry* **62** (1997) 8455-8458.
44. M. P. J. van Deurzen, F. van Rantwijk e R. A. Sheldon, *Tetrahedron* **53** (1997) 13183-13220.
45. V. M. Dembitsky, *Tetrahedron* **59** (2003) 4701-4720.
46. S. Hu e J. S. Dordick, *Journal of Organic Chemistry* **67** (2002) 314-317.
47. A. G. J. Ligtenbarg, R. Hage e B. L. Feringa, *Coordination Chemistry Reviews* **237** (2003) 89- 101.
48. L. Dai e A. M. Klibanov, *Biotechnology and Bioengineering* **70** (2000) 353-357.
49. E. Baciochi, M. F. Gerini, P. J. Harvey, O. Lanzalunga e S. Mancinella, *European Journal of Biochemistry* **267** (2000) 2705-2710.
50. K. Nakajima, M. Kojima, K. Toriumi, K. Saito e J. Fujita, *Bulletin of the Chemical Society of Japan* **62** (1989) 760-776.
51. M. Picard, J. Gross, E. Lübbert, S. Tölzer, S. Krauss, K.-H. van Pée e A. Berkessel, *Angewandte Chemie* **109** (1997) 1245-1248.
52. A. H. Vetter e A. Berkessel, *Tetrahedron Letters* **39** (1998) 1741-1744.
53. A. K. Sharipov, *Russian Journal of Applied Chemistry* **76** (2003) 108-113.
54. S. Kobayashi, M. Nakano, T. Kimura, e P. A. Schaap, *Biochemistry* **30** (1987) 5019-5022.
55. S. G. Allenmark e M. A. Andersson, *Chirality* **10** (1998) 246-252.
56. H. B. Ten Brink, H. E. Schoemaker e R. Wever, *European Journal of Biochemistry* **268** (2001) 132-138.
57. F. Di Furia e G. Modena, *Pure & Applied Chemistry* **54** (1982) 1853-1866.
58. H. B. Ten Brink, H. L. Dekker, H. E. Schoemaker e R. Wever, *Journal of Inorganic Chemistry* **30** (2000) 91-98.
59. A. Tuynman, M. K. S. Vink, H. L. Dekker, H. E. Schoemaker e R. Wever, *European Journal of Biochemistry* **258** (1998) 906-913.

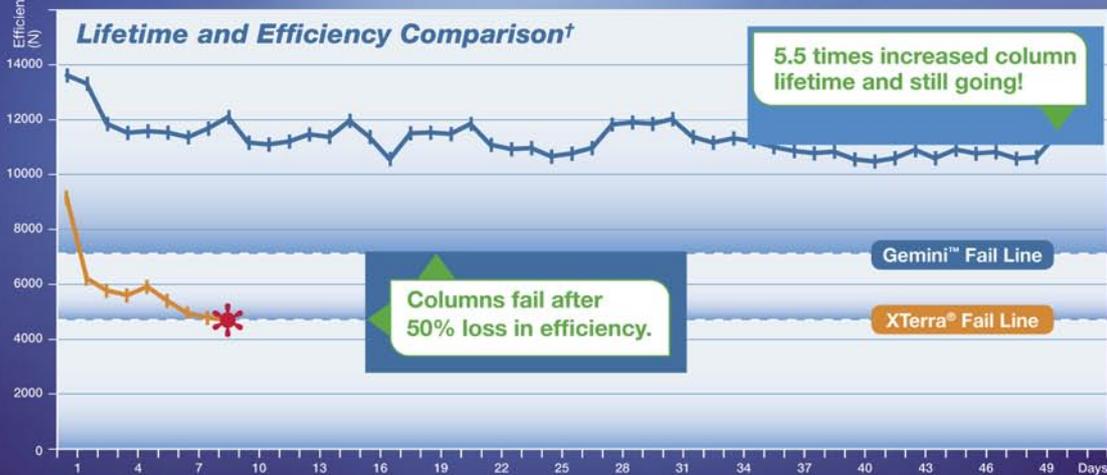
Mystery SOLVED

Gemini™ with new Twin™
(Two-In-One) Technology
provides pH 1-12 stability with
no sacrifice in performance.
Gemini is engineered to provide
unmatched performance
and column lifetime.



Gemini™

Gemini™ C18 vs. Waters® XTerra® MS C18*



Columns: Gemini™ 5µ C18
Waters® XTerra® 5µ
MS C18

Dimensions: 150 x 4.6mm

Mobile Phase: Acetonitrile/50mM
Methylpyrrolidine
Buffer, pH 11.5
(50:50)

Flow Rate: 1 mL/min

Temperature: Ambient

Detection: UV @ 254nm

Sample Analyte: Diphenhydramine

■ Gemini™ C18
■ Waters® XTerra® MS C18

Visit

www.phenomenex.com/gemini



www.phenomenex.com

Phenomenex products are available worldwide. For the distributor in your country, contact Phenomenex USA, International Department by telephone, fax or e-mail: international@phenomenex.com.

USA
tel.: (310) 212-0555
email: info@phenomenex.com

Puerto Rico
(800) 541-HPLC
info@phenomenex.com

Canada
(800) 543-3681
info@phenomenex.com

United Kingdom
01625-501367
ukinfo@phenomenex.com

Germany
06021-58830-0
anfrage@phenomenex.com

New Zealand
09-4780951
info@phenomenex.co.nz

Australia
02-9428-6444
info@phenomenex.com.au

phenomenex®
...breaking with tradition™

*XTerra® is a registered trademark of Waters, Inc. Gemini™ is a trademark of Phenomenex. Phenomenex is in no way affiliated with Waters.

© 2004 Phenomenex Inc.

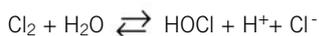
A água sabe a lixívia

MARIA FILOMENA CAMÕES*

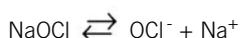
A água de abastecimento público, é, por imposição legal, de qualidade própria para consumo humano, isto é, potável. Algures ter-nos-ão dito que a água é insípida, incolor e inodora; são as chamadas características organolépticas, isto é aquelas que são detectadas pelos nossos sentidos. Sabemos entretanto que não só a água, H₂O, não é estritamente incolor do ponto de vista espectroscópico, como também encontramos águas com diferentes sabores e até odores, que lhe são conferidos por substâncias nela dissolvidas. Para além destas características físico-químicas, que devem obedecer a limites estabelecidos em diplomas próprios (Lei da Qualidade da Água, DL 236/98 e 243/2001), a água deve ser bacteriologicamente pura, isto é, deve estar isenta de microorganismos patológicos. Durante décadas foi esta última a principal preocupação relativamente à qualidade da água para beber e uma das formas tradicionais de o conseguir, a nível doméstico, era a fervura. Outras formas de conseguir essa desinfecção usadas em grande escala pelas instituições de distribuição, são a **cloragem** e, mais recentemente, a **ozonização**.

Na cloragem, a acção anti-séptica do cloro deve-se à hidrólise do cloro molecular, Cl₂, ou à acidificação de um hipoclorito (ex: hipoclorito de sódio, NaOCl) dando lugar à formação de ácido hipocloroso, HOCl, que é um agente bactericida. A lixívia de uso doméstico é uma solução aquosa de hipoclorito de sódio ou de potássio.

Quando Cl₂ é adicionado à água, ocorre a reacção de hidrólise

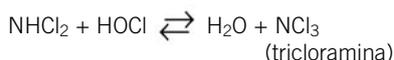
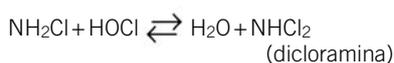
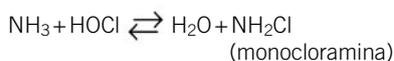


No caso do hipoclorito de sódio, NaOCl, em solução aquosa, este dissocia-se

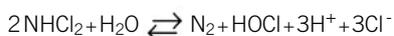


O facto de a espécie química HOCl ser um melhor desinfectante que a sua base conjugada OCl⁻ (de mais difícil penetração nas bactérias devido à carga), torna o valor de pH um parâmetro importante na eficácia da cloragem.

Caso amónia, NH₃(aq), esteja presente na água, o ácido hipocloroso pode reagir com o amoníaco produzindo cloraminas,



As cloraminas decompõem-se mesmo na ausência de outro material reactivo.



Esta reacção ocorre até que todo o azoto amoniacal é oxidado a azoto molecular. A partir deste ponto, a adição de mais “cloro”, seja ele efectivamente cloro, Cl₂, ou um composto clorado, vai dar origem a cloro livre residual.

Apesar de não ser uma prática corrente em Portugal, as próprias cloraminas podem ser utilizadas como agentes desinfectantes. As espécies HOCl e OCl⁻ são mais vantajosas por requererem tempo de contacto mais curto e uma

dosagem menor, para o mesmo nível de desinfecção. As cloraminas apresentam a seu favor o facto de produzirem um residual mais estável que o do cloro, garantindo uma acção de desinfecção mais prolongada ao longo do tempo e das condutas da água. Por esta razão são utilizadas frequentemente nas desinfecções secundárias, onde o maior interesse se centra no seu poder residual e não tanto na potência da desinfecção.

O cloro é um desinfectante bastante forte e encontra utilização não só na desinfecção da água mas também na destruição por oxidação de compostos causadores de cheiros, sabores e cores indesejáveis, em outros sectores de actividade.

É preocupante que, na desinfecção de águas de efluentes, estejam a ser utilizadas cada vez maiores quantidades de “cloro” e que os níveis de cloro residual sejam baixos. Tal significa que, as medidas de prevenção não estarão a ser eficazes, com a carga poluente das águas a aumentar. A perda de concentração de cloro residual processa-se por vaporização natural, ou por reacções do cloro com outras espécies químicas presentes. Estas reacções, sobretudo com compostos orgânicos, dão origem a compostos organoclorados (ex: clorofórmio, clorobenzenos e clorofenóis), subprodutos conhecidos pelo nome genérico *Desinfection By-Products*, DBPs, alegadamente cancerígenos. A eliminação destes compostos tóxicos, consegue-se à custa da permanência em locais de retenção, por tempo mais ou

* CECUL – Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (fcamoes@fc.ul.pt)

menos prolongado, acompanhada de oxigenação por arejamento.

A água da torneira, se for guardada num recipiente, de preferência de vidro (evitar metal que corre o perigo de ser oxidado com passagem dos iões respectivos para a água), vai perdendo cloro residual e, em uma ou duas horas, terá perdido o desagradável sabor a “cloro”.

Outro processo de desinfecção da água de beber, é a **ozonização**, ou oxidação por ozono, O_3 . O ozono é o oxidante mais potente que se pode produzir industrialmente de forma económica, sendo o mais usado na Europa e nos Estados Unidos da América. É muito reactivo e decompõe-se com facilidade em oxigénio atómico, O , e molecular, O_2 . O primeiro, O , é responsável por grande actividade química, o segundo tem a vantagem adicional de fornecer oxigénio, O_2 , recriando condições aeróbias. A decomposição é rápida, dependendo o tempo da carga poluente existente, do pH e da temperatura. Tem forte acção sobre as bactérias, sendo considerado o agente microbicida mais rápido e eficaz que se conhece. A sua acção possui um largo espectro na eliminação de bactérias, vírus e fungos. Destroí grande número de moléculas orgânicas, decompondo as macromoléculas em fracções mais simples. O ozono reage mais eficazmente com compostos orgânicos insaturados, mais nas duplas ligações $C=C$ do que nas $C=N$.

Concentrações de 0,1 a 0,5 mg/L, durante 5 segundos, eliminam as bactérias

e a maior parte dos esporos e larvas de insectos. Além da desinfecção e da oxigenação da água, tem-se observado o seu poder de flocular matéria orgânica coloidal. A vasta aplicação do processo no ataque aos microrganismos, tem levado a verificar a forte acção desodorizante e, como consequência, o seu aproveitamento para tratamento de certos odores de origem industrial.

O ozono desaparece muito rapidamente e não comunica sabor ou cheiro à água. No entanto, a aplicação do ozono não é isenta de perigos e carece de cautela. A água ozonizada não deve ser consumida directamente, devendo ser alvo de tratamento que garanta a eliminação de ozono residual, por desarejamento, em cascata ou outra forma de contacto intenso ou prolongado com o ar. Existe também evidência da oxidação de espécies químicas minerais, cloretos Cl^- , a cloratos, ClO_3^- ; brometos, Br^- , a bromatos, BrO_3^- , etc., de toxicidade a não desprezar.

Embora hajam utilizações menos exigentes do que a água potável (ex: rega), esta não corresponde de todo ao grau de pureza mais exigente; havendo utilizações que requerem maior purificação. Aplicações clínicas, ou usos laboratoriais são exemplos conhecidos, em que se exige água destilada, ou desionizada. O objectivo é a purificação, isto é a separação da água dos contaminantes que a acompanham. Essa purificação é efectuada normalmente por destilação, ou por desionização ou desmineralização.

Na destilação destila-se, isto é aquece-se e recolhe-se o vapor que se condensa. No balão de destilação ficaram resíduos não voláteis, mas como o processo não é 100% eficiente a água obtida por destilação terá ainda níveis vestigiários de contaminantes que acompanharam o vapor. Caso seja necessário, pode-se repetir a destilação uma ou duas vezes e obtém-se água bidestilada, ou tridestilada, de maior pureza. A destilação liberta a água de contaminantes orgânicos e inorgânicos não voláteis. Em muitos locais, em alternativa à água destilada, usa-se água desionizada, a que, como o nome diz, foram removidos os iões das substâncias nela dissolvidas, por interacção com resinas troca-iónica, troca catiónica para os catiões e troca aniónica para os aniões. Pense-se no exemplo de uma água com uma substância mineral, iónica, dissolvida, ex: o sal cloreto de sódio, $NaCl$, e outra orgânica, molecular, ex: açúcar, $C_6H_{12}O_6$. A sua destilação remover-lhe-á açúcar e cloreto de sódio, mas a sua desionização ou desmineralização só será eficaz sobre o cloreto de sódio. Por isso, antes de submeter água a desionização ela deverá ser previamente alvo de uma destilação que lhe remove as substâncias orgânicas; só depois deverá ser introduzida nas colunas de resinas, tendo também já uma menor carga de compostos minerais. Caso se pretenda uma água destilada ou desionizada mais isenta de matéria orgânica, já em pequena quantidade, pode submeter-se a água à acção de radiação ultra-violeta.

Química preenche mais vagas na 1.ª fase

Na 1.ª fase de acesso ao ensino superior foram preenchidas 1065 das 1686 vagas disponíveis em cursos da área de Química (63,2 %). Estes números indicam uma ligeira recuperação em relação ao ano anterior, quando foram preenchidas 1055 das 1746 vagas postas a concurso (60,4%). Os cursos com maior número de candidatos são os cursos de Bioquímica, que preencheram 99% das vagas disponíveis, deixando apenas 6 vagas para a 2.ª fase. Na situação oposta encontram-se os cursos de Física e Química (Ensino), com apenas 18% das vagas preenchi-

das num total de 80. Os cursos de Engenharia Química registam uma procura moderada, com 46% das vagas preenchidas, deixando 367 vagas disponíveis para 2.ª fase. No entanto, as 70 vagas da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto foram totalmente preenchidas, sendo a nota do último aluno colocado 140,0. Os cursos de Química (incluindo Química, Química Industrial, Química Aplicada e Química Tecnológica) tiveram uma percentagem de ocupação próxima da média da área (63%). Num total de 490 vagas disponíveis, sobram 182 para a 2.ª fase. Neste caso, há 3 instituições com preenchimento total das vagas: Universidade do Porto - Fa-

culdade de Ciências (Química), Universidade Nova de Lisboa – Faculdade de Ciências e Tecnologia (Química Aplicada), e Universidade do Minho (Química Aplicada, ramo de Materiais Plásticos). Esta análise por sectores revela uma inversão na taxa de ocupação dos cursos de Química e de Engenharia Química entre 2004 e 2005. Em 2004, as taxas de ocupação foram de 59% nos cursos de Engenharia Química e de 42% nos cursos de Química. Em números absolutos, relativamente a 2004, as licenciaturas em Química ganharam 67 alunos enquanto as licenciaturas em Engenharia Química perderam 100 alunos.

Paulo Ribeiro Claro

Pilha de combustível

ANABELA VIEGAS*, MARIA CLARA MAGALHÃES**, MARIA ISABEL FERREIRA***

Sugestões para a actividade

Há diversos aspectos relacionados com a electroquímica que se podem explorar, tais como: a constatação e entendimento da electrolise, nomeadamente as reacções de oxidação-redução; a cinética das reacções químicas; e questões de ácido-base e precipitação.

A ficha de trabalho experimental (**Pilha a água salgada!**) encontra-se na parte dos alunos. Começa com a questão: «Como criar um dispositivo que utiliza água salgada para transformar energia química em energia eléctrica?»

A partir das respostas apresentadas pelos alunos, o professor poderá ir facultando pistas indicando o material disponível.

Introdução

Enquadramento geral (socioeconómico a nível mundial) das necessidades mundiais e do desenvolvimento sustentado

O estudo da pilha de combustível é importante na medida em que contribui para uma evolução na questão energética. Poderá ajudar na travagem ao aumento do aquecimento global, resultante do consumo desenfreado dos combustíveis fósseis, e também pode ser importante para satisfazer as necessidades dos países em desenvolvimento.

Sabe-se que continuar a utilizar as fontes primárias de energia: carvão e petró-

leo não corresponde à exigência de um desenvolvimento “sustentável”, uma vez que há uma tomada de consciência, por parte da população em geral, dos danos que provocam, designadamente no que concerne à qualidade do ar e às suas consequências para a saúde pública. *Boeker e Grondelle* [1] e *Baird* [2] referem os gases que mais contribuem para o aumento do efeito de estufa, bem como a concentração destes gases na troposfera. O dióxido de carbono, o metano e os óxidos de azoto são exemplos relevantes de gases que contribuem para o aumento do efeito de estufa. Elevadas concentrações de monóxido de carbono ingerido pelo ser humano conduzem ao envenenamento da hemoglobina no sangue o que, em situação extrema, provoca a morte por asfixia [3]. Devido à combustão incompleta de combustíveis fósseis são libertadas para a atmosfera dioxinas. Em elevadas concentrações estas poderão causar, entre outros, problemas respiratórios [3].

O consumo excessivo de combustíveis fósseis, especialmente por parte dos países ricos, levou a uma mobilização social em torno de novas soluções para o sector energético. Segundo dados dos peritos do sector energético, dentro de quarenta anos o petróleo deixaria de estar a preços acessíveis, no entanto os investigadores em geologia para o sector petrolífero referem que a crise vai chegar antes desta década. Neste contexto surge o Protocolo de Quioto, em 1998,

e nessa altura a Europa comprometeu-se a reduzir em 8%, em relação ao seu nível de 1990, as emissões de dióxido de carbono no período compreendido entre 2008 e 2012.

O sector dos transportes é apontado como o “mau da fita” do Protocolo de Quioto; com efeito, entre 1980 e 1999 o número de veículos de transporte de mercadorias quintuplicou e foi reforçado o papel do transporte individual, uma vez que este meio proporciona maior mobilidade. É verdade, ainda, que na União Europeia os transportes são responsáveis por 26% do total de emissões de dióxido de carbono e por 63% do total de emissões de óxidos de azoto.

A conjuntura energética da era “pós-Quoto” transforma as energias sustentáveis e não poluentes num enorme desafio, pelo que o hidrogénio tem potencialidade para mudar radicalmente a cultura ambiental da nossa civilização.

Quando a tecnologia estiver optimizada de modo a que o hidrogénio seja produzido e utilizado adequadamente, ele não se esgotará (a uma escala humana) e estará isento da produção de dióxido de carbono.

O hidrogénio é abundante, mas não existe livremente na superfície da Terra, pelo que terá de ser extraído das suas fontes naturais. Actualmente, cerca de metade do hidrogénio que se produz é extraído do gás natural. Utiliza-se vapor de água para converter o gás natural em hidrogénio comercial. Como o gás

* Escola Secundária de Oliveira do Bairro, Rua dos Colégios – Vale do Mouro, 3770-855 Oliveira do Bairro (viegasanabela@hotmail.com)

** Departamento de Química, Universidade de Aveiro, Aveiro

*** Departamento de Física, Universidade do Minho, Braga

natural é constituído essencialmente por metano, através das equações (1) e (2) traduzem-se estas transformações químicas.

Mas o gás natural é um hidrocarboneto e por isso haverá emissão de dióxido de carbono aquando do processo de obtenção do hidrogénio, o que não resolve o problema ambiental da redução das emissões de dióxido de carbono para a atmosfera. Além disso, prevê-se que o pico de consumo do gás natural seja entre 2020 e 2030 para depois diminuir até se extinguir [4].

Pode-se obter hidrogénio por electrólise da água (ver equação 3), recorrendo por exemplo à energia eléctrica obtida a partir de vapor fornecido geotermicamente através da energia produzida por outras fontes de energia renováveis. Este caminho está em progressivo desenvolvimento, existindo já na Dinamarca e na Noruega. Em Portugal também existem várias centrais eólicas produtoras de energia eléctrica. Como exemplo refere-se a que existe em Lamego—ver figura 1.

Nos dias de hoje já se produzem pilhas para uso doméstico que utilizam o hidrogénio como combustível [5]. Futuramente, segundo o Presidente da Fundação sobre Tendências Económicas, *Jeremy Rifkin* [5]: «na “economia de hidrogénio” até o automóvel será uma central eléctrica com rodas com uma capacidade geradora de 20 kW!». Uma vez que o automóvel está estacionado umas boas horas, poderá ser ligado à rede da casa, ou à oficina, injectando energia extra na rede. Se apenas um quarto dos condutores usassem os seus automóveis como “centrais eléctricas” para dar energia eléctrica à rede, poderiam ser eliminadas todas as centrais eléctricas de um país [5].



Figura 1 Fotografia de aerogeradores do Parque Eólico da Fonte da Mesa, situado na Serra das Meadas em Lamego.

Características do Parque:

Altitude do sítio	1090 m
Área do Parque	300 ha
N.º de aerogeradores	17
Vel. Média anual do vento	7,7 ms ⁻¹
Potência total instalada	10,2 MW

Características dos aerogeradores:

Altura da torre	40,5 m
Diâmetro das pás	42,0 m

Objectivos

- Compreender a pilha de combustível como sistema termodinâmico “limpo” que pode ser utilizada em veículos automóveis.
- Introduzir o estudo da célula de combustível.
- Criar uma célula electroquímica que envolve gases como reagentes.
- Explorar algumas reacções de oxidação-redução.

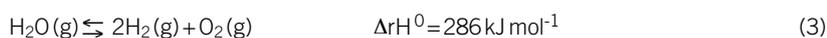
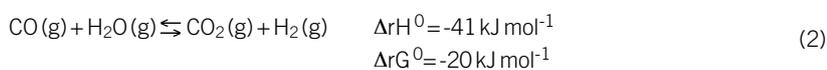
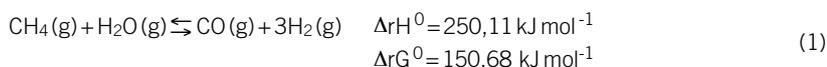
Pilha a água salgada!

Neste sistema demonstrativo efectua-se em primeiro lugar uma electrólise e posteriormente a transformação de energia química em eléctrica. Através da demonstração com este sistema procura-se responder ao problema:

- Como criar um dispositivo que utilize água salgada para transformar energia química em energia eléctrica?

Conceitos “chave”

Há que fornecer informações científicas aos alunos a fim de poderem interpretar o que sucede quando se executa o 7.º passo do procedimento. Ou seja, há transferência de electrões, do eléctrodo negativo da pilha seca para o eléctrodo positivo de cromoníquel. O eléctrodo que produz electrões é designado por ânodo (é o eléctrodo em que ocorre a oxidação) e o eléctrodo que recebe electrões é designado por cátodo (é o eléc-



trodo em que ocorre a redução). Por conseguinte, do pólo negativo da pilha seca saem electrões que entram no pólo positivo (cátodo) da pilha electrolítica. Estes electrões combinam-se com a água da solução aquosa e forma-se hidrogénio gasoso junto ao cátodo e hidróxido de sódio. Devido à formação da base consegue-se detectar um aumento no valor de pH. No ânodo da célula “artesanal”, os iões cloreto presentes em solução libertam electrões e produzem cloro gasoso que é libertado para a atmosfera. Poder-se-ia achar que se iria formar oxigénio gasoso em vez do cloro junto ao ânodo, uma vez que o potencial padrão de oxidação da água é maior do que o da oxidação do ião cloreto (oxidação-redução (4) e (5)). No entanto, no estudo dos processos electrolíticos verifica-se por vezes que a sobretensão necessária para iniciar uma dada reacção é consideravelmente superior ao valor dos potenciais de eléctrodo. Ou seja, a sobretensão, que é a voltagem adicional necessária para provocar a electrólise, para a formação de oxigénio é bastante elevada. Portanto, em condições normais de funcionamento forma-se no ânodo cloro gasoso além do oxigénio gasoso.

O cloro gasoso tem uma cor amarelo-esverdeado, mas a cor da solução observada não se deve a este gás atendendo à sua fraca solubilidade. Provavelmente resulta da complexação dos iões cloreto e hidróxido com os iões metálicos provenientes da oxidação do eléctrodo.



Quando se utiliza água da torneira, em vez de solução aquosa de cloreto de sódio ou água do mar, verifica-se que há formação de bolhas de gás mais lentamente do que na solução aquosa de cloreto de sódio, uma vez que a água da torneira contém iões dissolvidos, mas não é tão concentrada em iões como as outras soluções. Assim, pode-se falar na influência da concentração iónica na velocidade das reacções.

Pode-se esboçar um esquema do circuito eléctrico correspondente ao sistema da demonstração (figura 2).

É sabido que umas pilhas duram mais do que outras, no entanto a pilha seca que se utiliza muito nos laboratórios das escolas básicas e secundárias de Portugal continua a ser a rectangular de 4,5V (é constituída por três células de *Leclanché* associadas em série, gerando cada célula uma diferença de potencial de 1,5 V).

Poder-se-ia utilizar em vez de eléctrodos de cromoniquel, eléctrodos de platina pois para além de serem bons condutores eléctricos, proporcionam as superfícies

necessárias para a decomposição inicial das moléculas em espécies atómicas que antecede a transferência de electrões, ou seja são electrocatalisadores. Também se poderia dopar grafite com qualquer um destes catalisadores referidos, mas esta alternativa não é fácil de praticar nas escolas básicas e secundárias.

Qual o motivo porque à lupa se observa que o eléctrodo junto do qual se forma hidrogénio gasoso é cinzento e o outro está mais fino e ligeiramente acobreado?

Um dos eléctrodos fica mais fino, uma vez que se dissolve na solução.

Procedendo a uma análise simplista, sem considerar a possibilidade de formação de complexos dos iões metálicos, há que considerar o que se segue, atendendo à formação de cloro junto ao ânodo da pilha electroquímica.

Ao nível microscópico, teoricamente, pode, no cátodo, haver redução de Na^+ , H_2O ou H^+ , uma vez que os potenciais de redução das respectivas equações (ver equações 6 a 8) são menores do

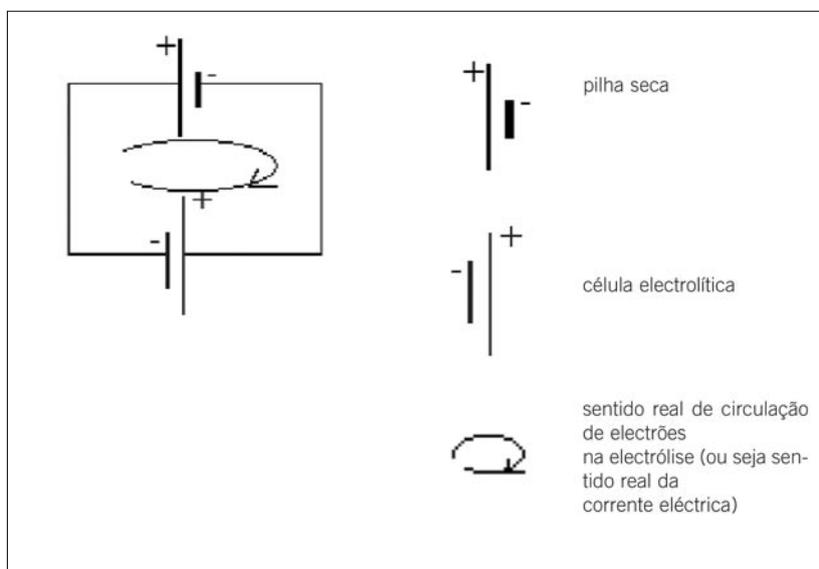


Figura 2 Esquema do circuito eléctrico de demonstração para a electrólise.

que o potencial fornecido pela pilha de *Leclanché*.

De acordo com a experiência efectuada verificou-se que o pH após a electrólise era 12, pelo que a solução é básica, portanto a concentração de iões H^+ no final é demasiado baixa. Os potenciais zero e $-0,83V$ implicam que a pressão de hidrogénio seja uma atmosfera e as concentrações de ião hidrogénio e ião hidróxido 1 mol dm^{-3} , e o potencial $-2,71 V$ implica que a concentração de ião sódio seja também a concentração padrão, o que não corresponde à realidade da experiência.

Uma vez que se obteve, após a aplicação de uma diferença de potencial, dois eléctrodos diferentes, obteve-se uma pilha. O facto de se formarem dois gases diferentes em cada eléctrodo é um contributo para haver um aumento de potencial.

Quando se desliga a pilha seca do circuito há uma inversão de funções dos eléctrodos. Supostamente o cromoníquel terá comportamento de catalisador, pelo que a velocidade das reacções inversas à electrólise vai aumentar. Ou seja, o hidrogénio gasoso na superfície do eléctrodo que funcionava como cátodo, e que passa a ser ânodo, liberta electrões e protões, como se pode ver em (9).

Os protões flúem na solução aquosa e os electrões pelo circuito externo, portanto no outro eléctrodo, ou seja no cátodo, forma-se ião cloreto (equação 10). Observou-se experimentalmente que a diferença de potencial decaiu imediata-

mente para aproximadamente $1 V$ e sabe-se que em condições padrão este valor seria $1,36 V - 0,00 V = 1,36 V$. O valor observado decresce progressivamente, uma vez que a concentração de hidrogénio gasoso e de cloro gasoso vai diminuindo à medida que estas substâncias vão sendo consumidas. Caso fossem continuamente renovadas, a pilha electrolítica iria produzir uma diferença de potencial sempre constante (aproximadamente $1 V$).

O facto de se utilizar água da torneira em vez de água destilada na dissolução do cloreto de sódio abre caminho para a análise de águas, como por exemplo a detecção da dureza da água ou de diversos tipos de substâncias que esta possa conter. Particularizando, também seria interessante ver a origem dos cloretos na água da torneira que se sabe existir devido ao tratamento das águas de abastecimento.

Como a pilha electrolítica se comporta como uma célula de combustível, uma vez que há transformação de energia química em energia eléctrica, pode-se calcular o seu rendimento máximo teórico utilizando a equação:

$$\eta = \frac{\Delta G}{\Delta H} = 1 - \frac{T\Delta S}{\Delta H}$$

Na pilha electrolítica, as semi-reacções de oxidação-redução que ocorrem preferencialmente em cada um dos eléctrodos (e não considerando a formação de complexos) são traduzidas por (9) e (10), logo a reacção de oxidação-redução global é traduzida por (11).



Para determinar o rendimento máximo teórico da pilha electrolítica é necessário calcular, nas condições reais de laboratório, a variação de energia de Gibbs da reacção. No entanto, como apenas se pretende perceber a ordem de grandeza do rendimento, calcula-se a variação da energia de Gibbs padrão da reacção (11), $\Delta_r G^0$, a $25^\circ C$. Para isso recorre-se a valores tabelados da variação de energia de Gibbs padrão de formação, $\Delta_f G^0$, a $25^\circ C$.

$$\Delta_r G^0 = 2\Delta_f G^0(HCl) - [\Delta_f G^0(H_2) + \Delta_f G^0(Cl_2)] = -262,46 - 0 = -262,46 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Também é necessário recorrer a valores de variação de entalpia padrão correspondente.

$$\Delta_r H^0 = 2\Delta_f H^0(HCl) - [\Delta_f H^0(H_2) + \Delta_f H^0(Cl_2)] = -334,32 - 0 = -334,32 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Logo, o rendimento teórico máximo, em condições padrão e à temperatura de $25^\circ C$ será:

$$\eta_{\text{máx}} = \Delta_r G^0 / \Delta_r H^0 = 0,78$$

Referências

- 1 E. Boeker e R. van Grondelle, *Environmental Physics*, J. Wiley & Sons, Chichester, 1995.
- 2 C. Baird, *Environmental Chemistry*, 3rd edition, W. H. Freeman and Company, New York, 1997.
- 3 A. Winfield, *Environmental Chemistry*, Cambridge University Press, New York, 1995.
- 4 Dossier Especial: Energias Alternativas – A Pilha de Combustível, em <http://www.negocios.pt/estatico/automovel2002energias.asp> (acedido em Novembro 2002).
- 5 P. Hoffmann, *Tomorrow's Energy – Hydrogen, Fuel Cells, and the Prospects for a Cleaner Planet*, The MIT Press: Cambridge, 2001.

A SPQ CONTA CONSIGO!

O QUÍMICA conta com os seus sócios para cumprir a sua missão. Se está interessado em contribuir para as secções de Noticiário SPQ, Tomar Nota, ou tem uma ideia para as Actividades no Laboratório, contacte-nos em boletim@fe.up.pt. Todas as contribuições serão bem vindas!

Destaques

Fourth Mediterranean Combustion Symposium (MCS-4)

6-10 Outubro 2005 em Lisboa

Esta é a 4.^a de uma série de conferências sobre combustão que tem por objectivo congregar as comunidades científicas dos países banhados pelo Mediterrâneo envolvidas na investigação no domínio da combustão. No entanto, a conferência está aberta a cientistas, investigadores, engenheiros e estudantes de outros países. As edições anteriores tiveram lugar na Turquia, Egipto e Marrocos. Na última conferência foram apresentados mais de 100 artigos e 10 lições convidadas por cientistas de renome, que contribuíram para o sucesso científico da conferência. Todos os tópicos científicos e tecnológicos do domínio da combustão são abrangidos pela conferência. Em particular, na presente edição estão previstos colóquios nas seguintes áreas: (i) Chamas laminares, (ii) Combustão em regime turbulento, (iii) Combustão de resíduos e combustíveis sólidos, (iv) Combustão estacionária, (v) Combustão em motores e sistemas de propulsão, (vi) Técnicas experimentais, (vii) Radiação térmica, (viii) Formação e controlo da emissão de poluentes, (ix) Fogo e explosões (x) Cinética química em combustão e (xi) Novas tecnologias de combustão.

Para mais informações e inscrições contactar a organização.

E: mfafonso@navier.ist.utl.pt
URL: www.combustioninstitute.it/next/MCS4/firstMCS4.htm

V Congresso Ibero-Americano de Biofísica

12-15 Outubro 2005 no Rio de Janeiro, Brasil

O V Congresso Ibero-Americano de Biofísica será realizado na cidade do Rio de Janeiro, Brasil, entre os dias 12 e 15 de Outubro. À semelhança de versões anteriores, é esperada uma grande participação internacional no evento, o que

irá promover intensas discussões e a integração dos grupos de biofísica dos vários países que irão ao congresso. O programa irá abordar as várias áreas da biofísica, desde a relação entre a estrutura molecular e a função biológica, até às áreas mais tradicionais como bioenergética e electrofisiologia.

E: Ibero@biof.ufrj.br
URL: www.congressobiofisica.hpg.com.br

6th Short Course of the Portuguese Biophysical Society

From Membrane Transport to Neurosciences: a Biophysical Perspective

14-16 Outubro 2005 em Santarém

A Sociedade Portuguesa de Biofísica vai organizar o seu curso anual, o sexto desde a sua criação, este ano subordinado ao tema: "From Membrane Transport to Neurosciences: a Biophysical Perspective", a decorrer entre os dias 14 e 16 de Outubro de 2005, na Casa do Brasil, em Santarém.

O objectivo deste curso é proporcionar uma introdução geral, de uma perspectiva biofísica, ao transporte biológico e às suas relações com as neurociências. As palestras vão incidir sobre aspectos gerais do transporte biológico e a sua regulação, incluindo os sistemas moleculares responsáveis por estes fenómenos. A relação especial entre o transporte biológico e as neurociências irá ser focada, com diversas palestras sobre este tema, desde investigação fundamental até aspectos na saúde.

O curso é dirigido a uma audiência alargada oriunda das mais diversas Universidades, Institutos e Laboratórios portugueses e espanhóis, especialmente estudantes de doutoramento, recém-licenciados ou finalistas de áreas de Bioquímica, Química, Biologia, Engenharia ou afins.

O programa do curso com os temas a abordar poderá ser visualizado na respectiva página web.

E: soveral@dq.fct.unl.pt
URL: www.itqb.unl.pt/~biophysics/course.html

Fórum da Química 2005 FCT-UNL

24-26 Outubro 2005 em Lisboa

Este ano decorrerá o III Fórum da Química, entre 24 e 26 de Outubro, sob o tema "Ciência, Tecnologia e Inovação", organizado por alunos da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, direccionando-se a todos os interessados em áreas como Química, Bioquímica, Farmácia, entre outras.

O principal objectivo deste Fórum consiste na divulgação de projectos de investigação com conceitos e tecnologias actualmente em desenvolvimento. A par disso, como habitualmente, será dado algum destaque às evoluções futuras, mostrando algumas das perspectivas possíveis na área.

E: forum.quimica@dq.fct.unl.pt
URL: www.dq.fct.unl.pt/forum_da_quimica



IV Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química (DEDQ)

27 e 28 Outubro 2005 em Lisboa

O 4DEDQ – 4.^o Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química (evento integrante do Programa "Atracção Química" da SPQ) vai realizar-se nos dias 27

e 28 de Outubro de 2005, em Lisboa, no Parque das Nações, e é uma organização conjunta da SPQ e do Pavilhão do Conhecimento – Ciência Viva.

Esta organização conjunta tem como objectivo levar aos sócios da SPQ, e a todos os interessados, um Encontro com um papel relevante na promoção da Química nas Escolas. Para isso, a Comissão Organizadora aposta num programa ambicioso, contemplando as vertentes de Ensino e Divulgação, e no aproveitamento das excelentes condições do local:

"Durante dois dias intensos, os participantes poderão assistir a Conferências Plenárias, optar entre Comunicações paralelas de Sessões temáticas, frequentar Oficinas ("workshops") variadas, discutir Comunicações em painel, participar em diversas actividades satélite, almoçar ou jantar num dos vários restaurantes do local e, porque não, fazer compras, passear à beira rio, ir ao cinema ... antes de pernoitar num hotel próximo! Parece interessante? Queremos que seja. E vamos trabalhar para que este interesse se transforme em algo que nos faça gostar de ser professores de Química! (e, é claro, sócios da SPQ!)"

A inscrição no 4DEDQ é possível através da página especialmente desenvolvida para este evento, acessível em www.spq.pt > Congressos ou directamente no endereço abaixo indicado.

E: acosta@pavconhecimento.pt

URL: www.spq.pt/congressos/4dedq

A Comissão Organizadora [António Costa (Pavilhão do Conhecimento – Ciência Viva), Eurico Cabrita (SPQ), Paulo Ribeiro Claro (SPQ), Pedro Tavares (SPQ)]

SPQ Analítica'05 – 5.º Encontro da Divisão de Química Analítica

27 e 28 Outubro 2005 em Coimbra

O encontro bianual da Divisão de Química Analítica da SPQ, SPQ-ANALÍTICA'05, vai realizar-se em Coimbra, Hotel D. Luis nos dias 27 e 28 de Outubro de 2005.

O programa constará de lições, comunicações e painéis sobre todos os temas da química analítica moderna, com especial ênfase para as novas áreas e futuras metodologias. As lições plená-

rias serão proferidas pelos Profs. Juan Cacho Palomar (Universidad de Zaragoza e Presidente da Sociedad Española de Química Analítica) e Giuseppe Palleschi (Universidade Tor Vergata, Roma).

E: analitica05@ci.uc.pt

URL: www.spq.pt/congressos/analitica05

Phytotherapy – The Role of an Ancient Tradition in Modern Times

1-5 Novembro 2005 no Funchal

O Centro de Química da Madeira e a Phytochemical Society of Europe, com o apoio do INFARMED, têm o prazer de convidar a comunidade científica que se dedica a todos os aspectos da Fitoquímica, Farmacognosia e Fitoterapia, a participar neste congresso, que se realizará na cidade do Funchal, Madeira (Hotel Crowne Plaza Resort Madeira), de 1 a 5 de Novembro de 2005.

"Phytotherapy – the Role of an ancient tradition in modern times" é uma excelente oportunidade para os cientistas, especialmente jovens investigadores, apresentarem os seus trabalhos e discutirem com prestigiados especialistas da área. Este encontro apresentará os avanços mais recentes na nossa percepção de como o conhecimento tradicional ajuda ao desenvolvimento de novas metodologias de tratamento. Alguns dos temas a abordar no evento incluem os campos da pesquisa de novos produtos naturais biologicamente activos, técnicas analíticas, estudos farmacológicos, interacções entre produtos à base de plantas e medicamentos convencionais e boas práticas de produção e regulamentação

medicamentos de uso humano, incluindo os produtos à base de plantas.

E: phytotherapy@uma.pt

URL: www.uma.pt/phytotherapy

TPI – Feira de Tecnologias e Produtos para a Indústria

16-19 Novembro em Lisboa

A AIP/FIL vai organizar de 16 a 19 de Novembro a TPI – Feira de Tecnologias e Produtos para a Indústria, abarcando todos os sectores de actividade, onde são integrados, entre outros, salões internacionais dedicados às Tecnologias do Ambiente, Energia e Gás Natural (Expoambiente) e à Química Industrial (Iberquímica).

Integrando o certame irá também decorrer o Evento de Investigação & Inovação Tecnológica, que tem como finalidade permitir que todos os envolvidos na Investigação & Inovação Tecnológica dêem a conhecer as suas principais tecnologias, know-how e linhas de investigação aplicada, num evento dedicado à cooperação tecnológica no sector industrial. Será promovida a transferência de ideias, conceitos e tecnologias novas e inovadoras, resultantes de actividades de I&D, para o tecido empresarial, contribuindo para um acréscimo da competitividade da indústria nacional.

Mais detalhes sobre este Certame e o Evento podem ser consultado na respectiva página web.

E: sandra.almeida@aip.pt

URL: www.tpi.pt



relacionada com medicamentos à base de plantas. O dia 1 de Novembro, data de início dos trabalhos do Congresso, é simultaneamente a data em que a União Europeia estabeleceu como o da entrada em vigor da nova legislação sobre os

Engenharia 2005 – Inovação e Desenvolvimento

21-23 Novembro 2005 na Covilhã

A Unidade Científico Pedagógica de Ciências de Engenharia da Universidade

da Beira Interior, vai organizar de 21 a 23 de Novembro a Conferência "Engenharia' 2005".

Este evento tem como objectivo fomentar o contacto entre investigadores de diversas áreas de Engenharia e possibilitar a divulgação das suas actividades, de inovação e de desenvolvimento, junto dos vários sectores de actividade económica.

A "Engenharia' 2005" está organizada em várias áreas temáticas e no seu âmbito irá decorrer o 5.º Concurso de "Pontes de Esparguete".

Para mais informações, consultar a respectiva página web.

URL: www.confeng.ubi.pt

workshops, um sobre educação e outro sobre bio-empresendedorismo. Toda a informação sobre este evento será permanentemente actualizada na respectiva página web.

E: secretariado@microbiotec2005.info
URL: www.microbiotec2005.info

8.º Encontro Nacional do Grupo de Fotoquímica

16 e 17 Dezembro 2005 em Coimbra

O 8.º Encontro Nacional do Grupo de Fotoquímica da SPQ terá lugar nos dias 16 e 17 de Dezembro de 2005 no Departamento de Química da Universidade de Coimbra.

reconhecidamente um nome de referência da fotoquímica portuguesa, por ocasião dos seus 60 anos.

Os prazos definidos são:

- submissão dos resumos e inscrições (sem agravamento): 31 de Outubro de 2005
- notificação da aceitação dos resumos e forma de apresentação: 18 de Novembro de 2005
- inscrição final (com agravamento): 2 de Dezembro de 2005

Para mais informações contactar por e-mail a organização.

E: 8FOT@qui.uc.pt
URL: www.who.uc.pt/8FOT

J. Sérgio Seixas de Melo (Presidente do Grupo de Fotoquímica e da Comissão Organizadora do 8.º Encontro Nacional de Fotoquímica)



Congresso Nacional Micro'05 – Biotec'05

30 Novembro - 3 Dezembro 2005 na Póvoa de Varzim

Pela primeira vez, as Sociedades Portuguesas de Microbiologia e de Biotecnologia organizam em conjunto um Congresso Nacional – o Micro'05-Biotec'05. Estima-se que este congresso, a decorrer entre os dias 30 de Novembro e 2 de Dezembro na Póvoa do Varzim, conte com a participação de mais de 500 participantes nacionais das áreas da Microbiologia e da Biotecnologia. Do programa destacam-se 6 sessões plenárias proferidas por cientistas nacionais e estrangeiros, 5 simpósios temáticos e 2

A data do Encontro ficou fortemente condicionada pelo 9MAF (9th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence) que se realizou no início de Setembro. No entanto, dada a vitalidade dos fotoquímicos portugueses é de esperar que o encontro seja na mesma muito participado.

O programa constará de lições (30 minutos), comunicações (15 minutos) e painéis sobre todos os temas da fotoquímica, fotofísica, fotobiologia, aplicações de técnicas luminescentes, novos materiais, sensores químicos, etc.

A organização estimulará fortemente a apresentação de comunicações orais, que terão um relevo especial no Encontro. Está prevista uma sessão de homenagem ao Prof. Dr. Hugh D. Burrows,

X Encontro Ibérico de Peptídeos

1-4 Fevereiro 2006 em Saragoça, Espanha

A décima edição do Encontro Ibérico de Peptídeos (XEPI) irá decorrer em Saragoça entre 1 e 4 de Fevereiro de 2006.

Esta reunião científica, de periodicidade bienal, serve de ponto de encontro aos investigadores Espanhóis e Portugueses que desenvolvem actividade na área dos peptídeos, estando também aberto à comunidade científica de outros países. O XEPI é um evento especialmente destinado à participação e apresentação de trabalhos de jovens investigadores. O programa científico incluirá conferências convidadas e comunicações orais, abarcando todos os aspectos relacionados com a síntese, estrutura e biologia de peptídeos.

E: xepi@unizar.es
URL: wzar.unizar.es/actos/xepi/index.htm

Secção compilada por Helder Gomes

Agenda

6-10 Outubro 2005 em Lisboa

Fourth Mediterranean Combustion Symposium (MCS-4)

E: mfafonso@navier.ist.utl.pt

URL: www.combustioninstitute.it/next/MCS4/firstMCS4.htm

12-15 Outubro 2005 no Rio de Janeiro, Brasil

V Congresso Ibero-Americano de Biofísica

E: lbero@biof.ufrj.br

URL: www.congressobiofisica.hpg.ig.com.br

14-16 Outubro 2005 em Santarém

6th Short Course of the Portuguese Biophysical Society

From Membrane Transport to Neurosciences: a Biophysical Perspective

E: several@dq.fct.unl.pt

URL: www.itqb.unl.pt/~biophysics/course.html

21-26 Outubro 2005 em Korinthos, Grécia

International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2005)

E: tsimos@mail.ariadne-t.gr

URL: www.uop.gr/~iccmse

24-26 Outubro 2005 em Lisboa

Fórum da Química 2005 FCT-UNL

E: forum.quimica@dq.fct.unl.pt

URL: www.dq.fct.unl.pt/forum_da_quimica

27 e 28 Outubro 2005 em Lisboa

IV Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química (DEDQ)

E: acosta@pavconhecimento.pt

URL: www.spq.pt/congressos/4dedq

27 e 28 Outubro 2005 em Coimbra

SPQ Analítica'05 – 5.º Encontro da Divisão de Química Analítica

E: analitica05@ci.uc.pt

URL: www.spq.pt/congressos/analitica05

1 Novembro 2005 em Praga, República Checa

Working Together in EU Research in Food Quality and Safety: Challenges and Opportunities for Young Scientists

E: DvorakovaZ@tc.cas.cz

1-5 Novembro 2005 no Funchal

Phytotherapy – The Role of an Ancient Tradition in Modern Times

E: phytotherapy@uma.pt

URL: www.uma.pt/phytotherapy

2-4 Novembro 2005 em Praga, República Checa

2nd International Symposium on Recent Advances In Food Analysis

E: iaeac@dplanet.ch

URL: www.iaeac.ch

14 e 15 Novembro 2005 em Brugge, Bélgica

Oil and Natural Gas Supply, Refining and Petrochemicals Production. Present Technological Trends and Scientific Contributions (GAS-FUEL 05)

E: info@gasfuel05.com

URL: www.gasfuel05.com

15-17 Novembro 2005 em Barcelona, Espanha

11.^{as} Jornadas de Análise Instrumental (JAI)

E: info@jai2005.com

URL: www.jai2005.com

16-19 Novembro em Lisboa

TPI – Feira de Tecnologias e Produtos para a Indústria

E: sandra.almeida@aip.pt

URL: www.tpi.pt

21-23 Novembro 2005 na Covilhã

Engenharia 2005 – Inovação e Desenvolvimento

URL: www.confeng.ubi.pt

30 Novembro – 3 Dezembro 2005 na Póvoa de Varzim

Congresso Nacional Micro'05-Biotec'05

E: secretariado@microbiotec2005.info

URL: www.microbiotec2005.info

12-14 Dezembro 2005 em Évora

4.º Encontro Nacional de Cromatografia

E: afreiras@uevora.pt

URL: www.dqb.fc.ul.pt/docentes/jmfmgueira/4encontrodecromatografia

16 e 17 Dezembro 2005 em Coimbra

8.º Encontro Nacional do Grupo de Fotoquímica

E: 8FOT@qui.uc.pt

URL: www.qui.uc.pt/8FOT

1-4 Fevereiro 2006 em Saragoça, Espanha

X Encontro Ibérico de Peptídeos

E: xepi@unizar.es

URL: wzar.unizar.es/actos/xepi/index.htm

6-8 Fevereiro 2006 em York, Reino Unido

Eight International Symposium on Advances in Extraction Techniques (ExTech@ 2006)

E: htc@ordibo.be

URL: www.ordibo.be/htc

2-4 Abril 2006 em Guimarães

International Symposium Polymers in Concrete (ISPIC)

E: ispic2006@civil.uminho.pt

URL: www.civil.uminho.pt/ispic2006

2-7 Abril 2006 em Kyoto, Japão

XXIst IUPAC Symposium of Photochemistry

E: irie@cstf.kyushu-u.ac.jp

URL: www.pac.ne.jp/photoiupac2006

22-26 Maio 2006 em Cáceres, Espanha

V Congresso Ibero-Americano de Física e Química Ambiental

E: jgallard@usal.es

URL: www.sifyqa.org.es/presentacion.php

12-14 Junho 2006 no Porto

II Conferência Internacional sobre a Água (IWC2006)

E: iwc2006@isep.ipp.pt

URL: www.iwc2006.isep.ipp.pt