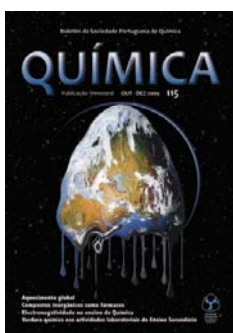


BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Propriedade de
Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870 – 1180
Registo na ERC n.º 125 525
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 115, Outubro – Dezembro 2009

Redacção e Administração
Av. da República, 45 – 3.º Esq.
1050-187 LISBOA
Tel.: 217 934 637
Fax: 217 952 349
bquimica@ist.utl.pt
www.spq.pt

Editor
Jorge Morgado

Editores-Adjuntos
Palmira Silva
Helder Gomes
Carlos Folhadela

Comissão Editorial
Hugh Burrows
Joaquim L. Faria
Ana Lobo
M. N. Berberan e Santos
A. Nunes dos Santos

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

Grafismo
Paula Martins

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

Tiragem
1850 exemplares

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

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

São autorizadas e estimuladas todas as citações e
transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem
prejuízo da necessária autorização por parte do(s)
autor(es) quando se trate de colaborações assinadas.
A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração
podem ser encontradas nas páginas interiores
deste fascículo.

Publicação subsidiada pela

FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia
MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E ENSINO SUPERIOR

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

EDITORIAL 2

ORIENTAÇÕES EDITORIAIS 3

NOTICIÁRIO SPQ

Vem Fazer Química Online! - A Página Web do Grupo de Químicos Jovens 5

LIVROS & MULTIMÉDIA

Nanotecnologia e Nanofísica - Conceitos de Nanociência Moderna 7

QUÍMICA E SOCIEDADE

Aquecimento Global 9

CONFERÊNCIAS

3rd EuCheMS – Chemistry Congress 17

ARTIGOS

Que é Feito da Revista Portuguesa de Química? 19

João Rocha

Compostos Inorgânicos como Fármacos 25

Mônica Aparecida Rodrigues, Reinaldo Ruggiero e Wendell Guerra

Electronegatividade: Uma Chave para a Resolução das Dificuldades de Aprendizagem em Química 31

Rute Amadeu e João Paulo Leal

Análise da Verdura das Actividades Laboratoriais do 10º Ano do Ensino Secundário 41

Dominique A. Costa, M. Gabriela T.C. Ribeiro e Adélio A.S.C.

Machado

DESTAQUES 52

AGENDA 56



JORGE MORGADO
 bqumica@ist.utl.pt
 www.spq.pt

O final de 2009 e o início de 2010 têm sido marcados por vários acontecimentos, uns de carácter global e outros de carácter mais específico para a Ciência e a Educação nacionais.

A nível global, e enquanto o mundo se encontra mergulhado numa grave crise económica e financeira, o final de 2009 fica marcado pela Conferência do Clima de Copenhaga – o último grande acontecimento de 2009! Quando, atendendo ao esforço que a ONU e a própria UE colocaram na sua organização, se esperava uma conferência que marcasse um novo compromisso global (dos 192 países da ONU), resultaram apenas algumas promessas e manifestação de vontades, sem que se conseguisse negociar um compromisso com objectivos bem definidos. Por outro lado, e apesar das enormes divisões que se verificaram, esta talvez tenha sido a conferência de carácter mais abrangente e esperamos que sirva como antecâmara para uma nova atitude e, quem sabe, tenha permitido criar as bases de um futuro entendimento global e vinculativo. Atendendo às circunstâncias climáticas que vivemos, e que se antecipa possam vir a ter um forte impacto nos próximos anos, decidimos abordar este tema neste número. O segundo facto que, a nível internacional, está a mobilizar a comunidade internacional foi a ocorrência de (mais) uma catástrofe – o sismo que assolou o Haiti e que mostra que, apesar de a Ciência permitir antecipar a ocorrência de tais fenómenos, não é ainda capaz de os prever e, assim, permitir que as populações se preparem, antecipando os seus efeitos.

A nível nacional queria realçar dois factos: o recente acordo conseguido entre o Ministério da Educação (ME) e os Sindicatos dos Professores e o acordo conseguido entre o Ministério da Ciência, Tecnologia e Ensino Superior (MCTES) e os representantes dos ensinos superior universitário e politécnico.

No primeiro caso, o acordo conseguido pela nova equipa do ME pode ter finalmente terminado com um prolongado período de conflito e instabilidade. Embora se façam ainda contas, entre ganhos e cedências de parte a parte, e faltem ainda avaliar as consequências, a longo prazo, deste acordo, também no contexto mais alargado da Administração Pública, é certo que, para já, o regresso de um clima mais calmo é de saudar.

No segundo caso, o acordo parece, no imediato, vir atenuar as enormes dificuldades económicas e financeiras que as universidades e politécnicos atravessam. Nos últimos anos, o MCTES encetou um reforço do investimento em Ciência, que nos coloca a níveis de financiamento mais consentâneos com a UE. Contudo, este investimento parece ter sido feito à custa da redução do investimento na Educação, que compensasse, por exemplo, os aumentos salariais e o aumento da contribuição para a Caixa Geral de Aposentações. Tal levou a que a maioria das universidades e politécnicos tenha, nos últimos tempos, feito alertas, mais ou menos dramáticos, à tutela. O acordo agora conseguido parece corresponder ao limiar mínimo que se considerava necessário para evitar situações de ruptura. A concretização das contrapartidas negociadas pelo MCTES parece, no entanto, suscitar muitas dúvidas.

Deste número (último de 2009), pretendo salientar quatro artigos. O primeiro aborda a reorganização das publicações das sociedades de Química europeias e, neste contexto, o desaparecimento da Revista Portuguesa de Química. Como aí se discute, é importante que os cientistas nacionais apostem nas revistas da *ChemPubSoc Europe* para divulgarem os seus trabalhos, aumentando o impacto dessas novas publicações e, também, as receitas da SPQ. O segundo artigo apresenta uma breve resenha sobre a utilização e o trabalho de investigação de complexos metálicos para fins médicos. O desenvolvimento de novos fármacos para combater várias doenças, como o cancro, passa também por um papel activo da Química Inorgânica. A evolução do conceito de electronegatividade é, de forma breve, abordada no terceiro artigo. Aí se discute também porque este conceito, muito importante em Química, deveria ser introduzido mais cedo nos programas de Química do Ensino Secundário. O último artigo desenvolve a aplicação de um conceito recente em Química Verde (QV) – a Estrela Verde – às actividades de laboratório do programa de Química do 10º Ano, propondo, como consequência, a modificação de algumas delas, também para que os nossos alunos interiorizem alguns conceitos de QV.

Um conjunto de outras pequenas contribuições completa este número que, espero, considerem interessante.

Boa leitura!

Jorge Morgado

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

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

QUÍMICA, não sendo especializado na história e filosofia da química, está aberto e pretende encorajar a publicação de contribuições nesta área. O QUÍMICA pode também incluir artigos de autores especialmente convidados para publicarem sobre temas específicos da história e da filosofia da química.

NORMAS DE COLABORAÇÃO E INSTRUÇÕES PARA OS AUTORES

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

LIVROS:

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

PUBLICAÇÕES PERIÓDICAS:

- G. Krager, *Nachrichten aus der Chemie* **53** (2005) 136-138.
- A.N.L. Lopes, J.G. Ferreira, *Analytical Biochemistry* **342** (2005) 195-197.

FONTES MANUSCRITAS:

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

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

ENDEREÇOS ELECTRÓNICOS:

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

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

- Os agradecimentos devem ser colocados no fim dos artigos, antes das referências.
- O corpo editorial acusará a recepção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores. Com base nas apreciações obtidas, será decidida a aceitação, recusa das colaborações propostas, ou eventualmente a revisão dos textos pelos autores antes de tomar uma decisão definitiva.
- Em casos especiais, sujeitos à concordância da Comissão Editorial do QUÍMICA, as contribuições poderão ser publicadas em inglês, ou noutra lín-

gua estrangeira, devendo então conter um resumo suplementar em português.

- Os artigos submetidos para publicação no QUÍMICA não podem ser submetidos a outras revistas. A reprodução de figuras já publicadas carece da devida autorização pelo detentor dos direitos. A autorização para reproduzir imagens é inteiramente da responsabilidade do autor, o que deverá ser referido nos casos em que se aplique.
- Os direitos de autor dos artigos publicados são propriedade da Sociedade Portuguesa de Química, não se autorizando a sua reprodução total ou parcial, mesmo sob a forma de tradução numa língua diferente, salvo com autorização escrita da Comissão Editorial.
- No caso dos autores desejarem corrigir as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente aquando da submissão do manuscrito.

11. As provas tipográficas dos artigos em co-autoria bem como as separatas serão enviadas para o autor responsável, a menos que o Editor seja informado do contrário.

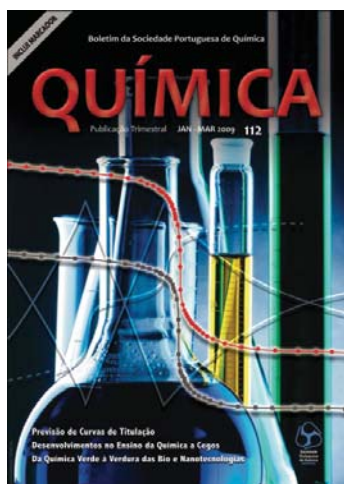
12. A inobservância de qualquer das normas de colaboração poderá levar à devolução do texto recebido.

CONTACTOS:

Editor do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química:

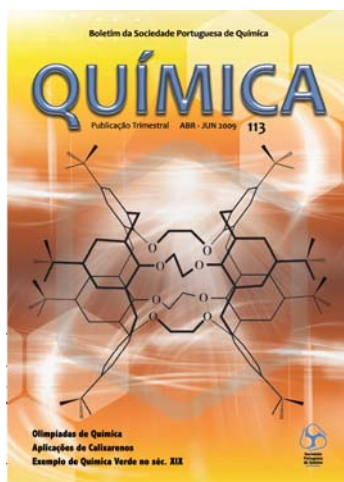
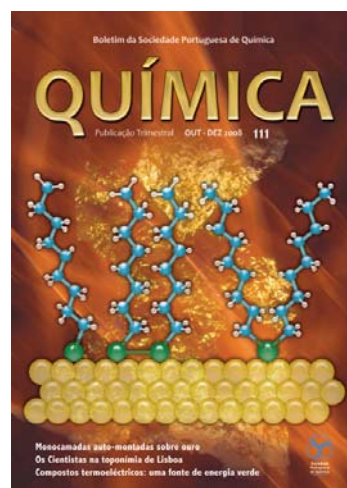
JORGE MANUEL FERREIRA MORGADO

Departamento de Engenharia Química e Biológica
Instituto Superior Técnico
Avenida Rovisco Pais - 1049-001 Lisboa
Tel.: 218 418 451 * e-mail: bquimica@ist.utl.pt

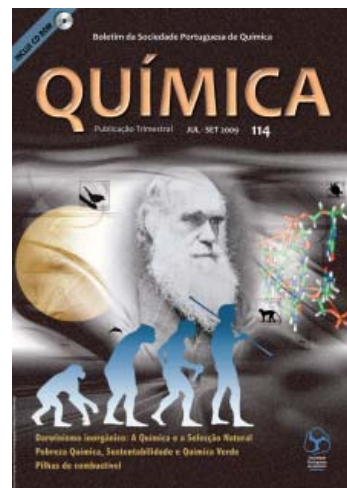


COLABORE CONNOSCO !

**FAÇA PARTE DO CONCEITUADO
LEQUE DE AUTORES, QUE JÁ
ESCREVEU E ESCREVE, PARA
O QUÍMICA, E AJUDE-NOS A
ENRIQUECER O MUNDO DA
QUÍMICA!**



Sociedade
Portuguesa
de Química



VEM FAZER QUÍMICA ONLINE! - A PÁGINA WEB DO GRUPO DE QUÍMICOS JOVENS -



No último número do Boletim apresentámos de uma forma geral os conteúdos da nova página *Web* do Grupo de Químicos Jovens (GQJ): <http://www.spq.pt/gqj/>. No presente número, apresentamos de uma forma mais detalhada as secções ChemRUs, JobChem e CheMba que consideramos de importância estratégica para o futuro do GQJ.

ChemRUs – este espaço foi criado com o objectivo de se tornar uma biblioteca de experiências de Química composta pela respectiva ficha pedagógica/científica e por um vídeo demonstrativo. Com esta iniciativa, pretendemos que a Química possa ser vista como uma disciplina divertida, responsável e de vital importância para a Sociedade. Para que esta biblioteca possa ser constituída, contamos com a participação da comunidade científica universitária, com os professores de química do ensino básico e secundário e muito em especial com os seus jovens alunos que são o futuro da Química em Portugal.

Nesta fase inicial, estão disponíveis experiências desenvolvidas por alguns jovens cientistas colaboradores do GQJ. No entanto, o ChemRUs é um espaço aberto a toda a comunidade química portuguesa, e espera-se a contribuição de todos para o aumento do portfolio de experiências. Contamos com o entusiasmo de muitos jovens estudantes do ensino básico e secundário e respectivos professores, para que desenvolvam experiências químicas e as disponibilizem para

que mais químicos possam aprender Química de uma forma entusiasta e interactiva.

Todas as experiências serão acompanhadas por uma ficha que poderá incluir a seguinte informação: introdução com perspectiva histórica; procedimento experimental detalhado com atenção às questões da segurança; breve discussão de mecanismos e fenómeno em estudo; possíveis aplicações da reacção, produtos ou materiais; conclusões e perguntas relativas aos conceitos subjacentes à experiência. Os critérios de escolha para a realização das experiências são: a segurança, o custo da experiência, a relevância dos conceitos para o estudo da química, a espectacularidade visual, etc. As fichas devem ser enviadas para gqj@spq.pt, e posteriormente será acordada a forma de disponibilizar o vídeo.

JobChem – este espaço pretende auxiliar os jovens químicos (JQ) a encontrar emprego científico. Assim esta secção está dividida em duas componentes:

- 1) Compilações de motores de busca com *sites* de oferta de emprego. Estes podem ser acedidos através dos *links* na barra lateral “Pesquisas Nacionais” e “Pesquisas Internacionais” com um simples *click* no seu título. É facultada uma breve descrição de cada motor de busca sugerido de forma a facilitar a sua utilização. Esta seleção inicial poderá ser enriquecida ou revista de acordo com os comentários dos utilizadores para jobchem.gqj@spq.pt.
- 2) A segunda componente deste *site* é constituída por um espaço onde entidades públicas e privadas poderão colocar directamente as suas ofertas de bolsas e empregos. Convidamos assim os diferentes responsáveis por projectos de investigação financiados com bolsas associadas e que estejam interessados em divulgar o con-

curso das mesmas, que façam o *download* da ficha que se encontra na página do GQJ e a enviem devidamente preenchida para jobchem.gqj@spq.pt. O mesmo convite é feito aos diversos gabinetes de estágios e recursos humanos de universidades e empresas privadas para que utilizem esta plataforma para divulgar os lugares disponíveis nas suas organizações.

Comentários, sugestões e participação nesta iniciativa podem ser encaminhadas via *email* para: jobchem.gqj@spq.pt ao cuidado de João Pedro Nunes, o jovem químico responsável por esta área do GQJ.

CheMba – este espaço surge com a intenção de guiar os JQ nos seus primeiros passos rumo ao empreendedorismo. Esta secção é composta por duas componentes:

- 1) A primeira é essencialmente informativa, uma vez que na barra lateral da secção, os utilizadores poderão encontrar informação actualizada sobre as principais instituições associadas ao empreendedorismo. Os JQ interessados em empreendedorismo podem ainda encontrar nesta secção informação relativa a programas de apoios à criação de empresas, a potenciais fontes de financiamento, a programas de formação em empreendedorismo, e a prémios a que o JQ poderá concorrer.
- 2) A segunda componente desta secção visa facilitar a interacção directa entre JQ e profissionais com formação em gestão. Assim, é dada a possibilidade de agendar reuniões entre os profissionais com formação em gestão e os JQ, onde estes últimos poderão discutir, estruturar e ponderar os desafios associados à empresarialização da sua ideia. Neste momento o CheMba conta já com cinco ex-alunos de MBA disponíveis para arrancar com esta iniciativa. O código de conduta CheMba, que descreve o âmbito e processo

desta iniciativa, está disponível na página do GQJ.

Comentários, sugestões e participação nesta iniciativa podem ser encaminhadas via *email* para:

chemba.gqj@spq.pt ao cuidado de Pedro Vidinha e Nuno Lourenço, os jovens químicos empreendedores responsáveis por esta área do GQJ.

Mais uma vez apelamos para a adesão dos jovens químicos (< 35 anos) ao GQJ.

Para oficializares a tua adesão ao GQJ basta enviarestes um fax (+351 217952349) ou *email* (sede@spq.pt) indicando o teu nome, nº de sócio da SPQ e a intenção de pertenceres ao GQJ. Só com a ajuda de todos o GQJ

se tornará um espaço incontornável na divulgação e celebração da Química por jovens em Portugal.

Contamos com a tua visita e participação!

Grupo de Químicos Jovens
Carlos Baleizão, Frederico Ferreira,
Pedro Gois

ACTUALIDADE CIENTÍFICA

ÁCIDO SULFÚRICO

O ácido sulfúrico é uma substância de elevada viscosidade, cujo aspecto oleoso lhe mereceu o nome Zayt al-Zaj, óleo de vitriol, por parte do seu mais provável descobridor, o pai da alquimia árabe, Jābir ibn Hayyān ou Geber. Jābir ou Geber escreveu tratados de filosofia, astronomia, medicina e biologia, mas a sua maior contribuição verificou-se no campo da alquimia. Introduziu a investigação experimental na alquimia, lançando as bases para a química moderna, ao realçar que «*A coisa primordial na alquimia é que se pode realizar trabalhos práticos e conduzir experiências*», acrescentando que «*quem não faz trabalhos práticos nem faz experiências nunca dominará a alquimia*».

Alguns autores atribuem a descoberta do ácido sulfúrico a outro árabe do século VIII, Abu Bakr Muhammad ibn Zakaryya al-Razi, Rahzes em latim, nascido na cidade de Ray ou Rhagae. al-Razi escreveu 21 livros de alquimia, dos quais o mais conhecido é o Kitab Sirr al-Asrar (Livro do Segredo dos Segredos) onde o filósofo discorre sobre os equipamentos e as substâncias utilizadas na alquimia. Outro dos seus tratados de alquimia, traduzido para latim como *Liber Experimentorum*, marcava claramente o aspecto experimental da alquimia, despindo-a da componente mística característica da escola de Alexandria.

Este ácido inorgânico, descoberto por um alquimista no século VIII, é actualmente o produto químico mais produzido no mundo (em termos de massa,

em número de moléculas perde para a amónia). Praticamente todos os produtos manufacturados entraram em contacto com H_2SO_4 em algum estágio da sua produção a tal ponto que até há bem pouco tempo o grau de industrialização de um país era medido pela produção anual de ácido sulfúrico.

Hoje em dia, a principal utilização de ácido sulfúrico é a produção de fertilizantes, dado que foi progressivamente substituído na produção de aço por outro ácido mineral descoberto por Geber, o ácido clorídrico. A produção de ácido sulfúrico passou a ser uma medida da actividade agrícola de um país.

Até ao século XVII, quando Johann Glauber preparou ácido sulfúrico queimando enxofre com salitre (nitrato de potássio, KNO_3) na presença de vapor de água, a produção de ácido sulfúrico permaneceu a preconizada pelos alquimistas árabes: a «destilação» seca de sulfatos sortidos, nomeadamente vitríolo verde ou sulfato ferroso ($FeSO_4 \cdot 7H_2O$) e vitríolo azul ou sulfato de cobre ($CuSO_4 \cdot 5H_2O$).

A síntese de Glauber, aperfeiçoada por vários químicos, entre eles Gay-Lussac, foi utilizada até ao século XIX. Em 1831, um comerciante britânico de vinagre, Peregrine Phillips, patenteou um processo novo de produção de ácido sulfúrico que, embora só tenha sido extensivamente utilizado a partir de finais do século XIX, dominou a produção deste composto a partir de meados do século XX. Actualmente, o ácido sulfúrico é essencialmente pro-

duzido de forma «verde», isto é, recuperando sub-produtos e resíduos de indústrias outrora muito poluentes.

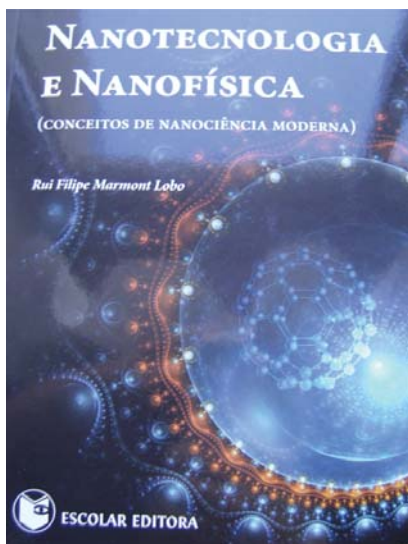
Como nota de curiosidade, refira-se que algumas lesmas do mar produzem ácido sulfúrico para afastar possíveis predadores. De facto, os nudibrânquios - literalmente, guelas ou brânquias nuas -, presentes em todos os oceanos e em praticamente todos os habitats marinhos, são especializadas em guerra química, recorrendo a um vasto arsenal de compostos como defesa contra predadores esfomeados. Enquanto algumas espécies produzem ácidos, outras segregam toxinas poderosas e outras ainda, os eolídeos, utilizam as armas químicas das espécies que lhes servem de alimento.

Palmira Silva

NANOTECNOLOGIA E NANOFÍSICA

CONCEITOS DE NANOCIÊNCIA MODERNA

POR Rui Filipe Marmont Lobo



Título: Nanotecnologia e Nanofísica

Autor: Rui Filipe Marmont Lobo

Edição: Escolar Editora

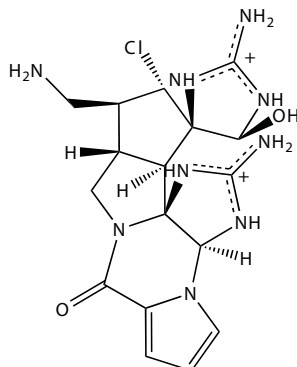
Surge em resultado das lições universitárias de Nanotecnologia proferidas pelo autor, desde 1998, e que têm vindo a ser progressivamente actualizadas, tentando acompanhar o espantoso desenvolvimento desta área científico-tecnológica, e visando simultaneamente colmatar uma lacuna de bibliografia em português sobre esta temática. Este volume apresen-

ta os princípios físicos que formam a base da ciência à nano-escala, a par de imagens e diagramas que melhor ilustram este intuito. Incluem-se ainda explicações intuitivas de modo a motivar a leitura por parte de estudantes, professores e também facilitar o acesso a um público interessado com formação científica em áreas mais abrangentes. (do autor).

ACTUALIDADE CIENTÍFICA

PREPARAÇÃO DE UM COMPOSTO COMPLEXO

Foi finalmente ultrapassado aquele que era considerado um dos maiores desafios a nível da síntese química. Desde há mais de uma década que vários laboratórios competiam entre si para a síntese de uma molécula, *amina de palau* (palau'amine), que fora isolada a partir de uma esponja marinha (*Stylotella agminata*) que se encontra em águas que circundam a República de Palau, no Pacífico Ocidental. Ela pode ajudar a esponja a evitar ser comida pelos peixes ou que nela se alojem micróbios.



Em 1993 (Kinnel *et al.*, *Journal of the American Chemical Society* **11** (1993) 3376) foi reportado que esta molécula exhibe actividade antitumoral, antibacteriana e antifúngica, moderada.

O desafio não resulta, por isso, da sua potencial utilização como fármaco. Contudo, a par das dificuldades iniciais de esclarecimento da sua estrutura, foi empreendida uma corrida para a sua síntese, dada a sua complexidade.

Os esforços empreendidos conduziram ao desenvolvimento de novas reacções e técnicas para formar moléculas complexas. A sua síntese foi agora publicada (Seiple *et al.*, *Angewandte Chemie International Edition* **48** (2009) 1).

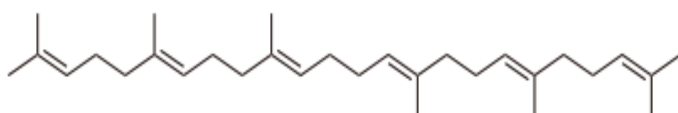
Envolve 25 passos e o rendimento final é de apenas 0,015%. Contudo, mais do que um desafio técnico, o procedimento adoptado demonstrou a eficácia de um conjunto de princípios para a realização de síntese orgânica, que está a ganhar adeptos pela sua simplicidade e rapidez.

Um dos reagentes empregues nesta síntese está a ser utilizado por uma companhia farmacêutica para a síntese de potenciais fármacos. (Adaptado de *Nature News* de 5 de Janeiro)

Jorge Morgado

O ESQUALENO

Nos últimos tempos, o esqualeno tem sido responsável por uma onda de alarmismo a propósito da vacina da gripe A. De facto, o esqualeno, assim como o α -tocoferol (a forma mais comum da vitamina E), faz parte do adjuvante da vacina produzida pela GlaxoSmithKline. Foram divulgadas por correio electrónico e em alguma imprensa suspeitas de supostas mazelas que o esqualeno provocaria, de artrite a lúpus, passando pela encefalomielite auto-imune experimental, não esquecendo a síndrome da Guerra do Golfo que seria devida ao esqualeno presente na vacina contra o antrax (por acaso, o esqualeno não foi utilizado nesta vacina). Na realidade, o esqualeno, quimicamente um isopreno como as vitaminas E e A, é um anti-oxidante de efeitos reconhecidos. Aliás, as fontes naturais de esqualeno são desde há tempos imemoriais parte integrante da nossa dieta e algumas foram mesmo consideradas panaceias universais.



Esqualeno

A realeza sueca recompensava os seus súbditos que se destacavam em exibições de força com coroas de amaranto, uma planta que foi um dos vegetais mais importantes da América pré-colombiana. Os gregos, por sua vez, usavam a oliveira para as coroas de glória. Nos primórdios dos Jogos Olímpicos, os atletas vencedores eram homenageados com coroas de oliveira, planta suplantada pelo louro com o domínio romano, mas retomada nos Jogos de 2004 na Grécia.

Na cultura mediterrânica, a oliveira, símbolo da paz, era considerada uma fonte de força e de saúde. Esta associação do amaranto e da oliveira a coroas de glória para feitos atléticos é curiosa uma vez que ambas as plantas se encontram entre as principais fontes vegetais de esqualeno.

Outra semelhança entre estas plantas é o facto de uma dieta rica em ambas (ou seus derivados) contribuir para a redução dos níveis plasmáticos de colesterol, embora no caso do amaranto sejam necessários mais estudos para confirmar os resultados preliminares e elucidar o mecanismo da sua acção.

Os efeitos benéficos do azeite na saúde humana são desde há muito reconhecidos. Está bem assente que a sua inclusão na dieta apresenta, entre outros benefícios, uma considerável redução do risco de cancro de mama. Theresa J. Smith e Harold L. Newmark, sugeriram que o efeito protector se deve à elevada quantidade de esqualeno contido no azeite (especialmente no extra virgem). De facto, existem numerosos estudos sobre o efeito do esqualeno, em aplicação tópica ou em administração sistémica, sobre vários tipos de cancro, da pele, do intestino e do pulmão, induzidos quimicamente em ratinhos. Os resultados obtidos sugerem que o esqualeno possui efeitos anticarcinogénicos notórios e alargados.

O esqualeno é um precursor da biossíntese de esteróides que está presente naturalmente no corpo humano, estando concentrado na pele onde fornece protecção contra germes e contra os danos oxidativos causados por radicais livres. O esqualeno apresenta assim propriedades que o tornaram muito importante em cosmética (e medicina), já que para além da acção anti-oxidativa actua a nível celular melhorando a oxigenação e regeneração dos tecidos e é absorvido rápida e profundamente.

Mas as fontes vegetais deste triterpeno só começaram recentemente a ser consideradas, uma vez que, como o nome indica, o esqualeno foi identificado pela primeira vez no óleo do fígado de peixes da família *Squalidae*, ou seja, óleo de fígado de tubarão,

uma das fontes mais ricas de esqualeno.



Vendido hoje em dia como bio-esqualeno, o óleo de fígado de tubarão é usado em larga escala como suplemento alimentar desde a antiguidade. Lee Ji Chin, que compilou a «enciclopédia» chinesa dos produtos medicinais, a Honzokomoku, identifica o óleo de fígado de tubarão como uma importante fonte de saúde e longevidade. No Japão, o «samedawa» ou «cura tudo» era um extracto do fígado dos tubarões bebido pelos pescadores de Soruga Bay. Em anos mais recentes, o óleo de fígado de tubarão tem sido igualmente muito utilizado na indústria cosmética. Assim, não é de espantar que o interesse económico do óleo de fígado de tubarão e a pesca intensiva associada tenham colocado algumas espécies na lista das espécies ameaçadas de extinção da União Internacional para a Conservação da Natureza e dos Recursos Naturais, a lista vermelha da IUCN.

Palmira Silva

AQUECIMENTO GLOBAL

1. CONFERÊNCIA DO CLIMA DE COPENHAGA

Apesar do enorme mediatismo, a Conferência do Clima das Nações Unidas realizada em Copenhaga (de 7 a 18 de Dezembro passado) parece ter ficado aquém das expectativas. Esperava-se um compromisso global mas ficaram apenas recomendações. Uma posição mais fraca do que a conseguida em Quioto, embora nessa altura os EUA tenham sido os grandes ausentes.

Neste encontro, do ponto de vista político, a Europa e o denominado grupo G8 (EUA, Japão, Reino Unido, Itália, Alemanha, França, Canadá e Rússia) parecem ter perdido o protagonismo que vinham evidenciando. Apesar do resultado conseguido, esta conferência trouxe para a arena os EUA e a China, emergindo também o Brasil e a Índia como intervenientes relevantes para qualquer acordo global. Aliás a própria ONU parece ter perdido protagonismo para os EUA. A "organização do mundo" em blocos de países consoante o seu grau de desenvolvimento (desenvolvidos e em vias de desenvolvimento) foi alterada nesta conferência.

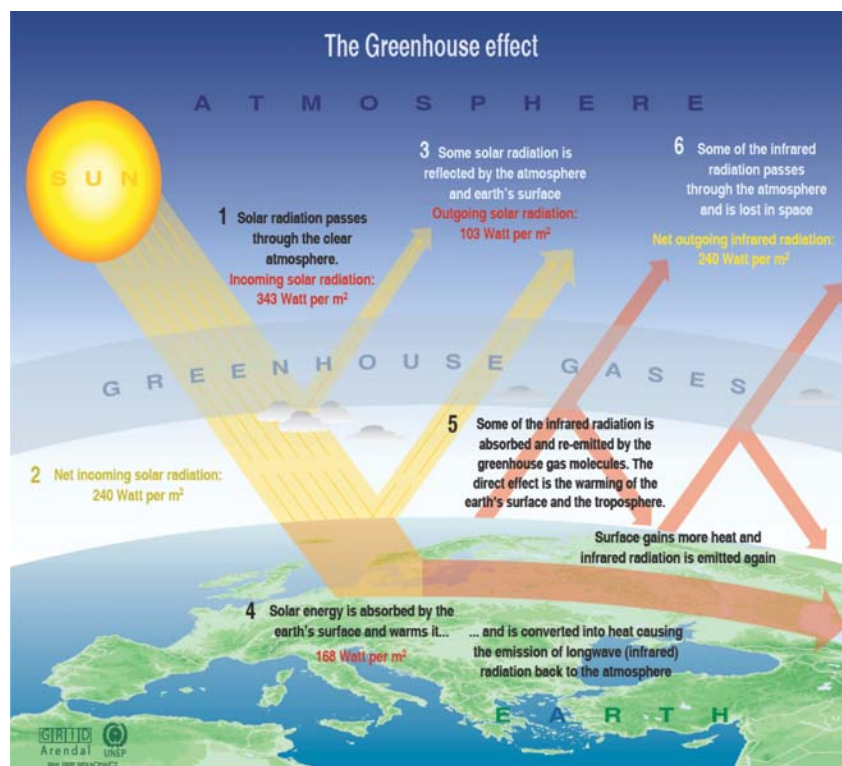
O G8 tinha anunciado, antes da Conferência de Copenhaga, numa reunião realizada em L'Aquila, a intenção de manter o objectivo de limitar o aquecimento a não mais de 2°C em relação às temperaturas pré-industriais. Acordaram também que os países industrializados poderiam reduzir as emissões conjuntas dos gases com efeito de estufa em 80% até 2050 e, em conjunto com outros países, reduzir as emissões globais em 50% no mesmo período. Contudo, esta decisão foi adiada para as negociações de Copenhaga e nesta não foi possível conseguir um compromisso desse tipo.

Entretanto, segundo um estudo recente (O'Neill *et al*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, doi:10.1073/0903797109 (2010)), apenas uma mobilização em massa poderá, eventualmente,

reduzir em 50% as emissões dos gases causadores do efeito de estufa até 2050, a menos que ocorra uma alteração radical dos padrões de desenvolvimento globais. Os esforços a desenvolver na segunda metade do século teriam, ainda assim, que ser enormes para conseguir limitar o aumento de temperatura a 2°C em 2100. O estudo sublinha as dúvidas existentes sobre o objectivo de 2°C, usado por muitos políticos como instrumento para adiarem compromissos de curto prazo mais credíveis. O estudo fornece, contudo, novos argumentos para as discussões sobre quando tem que ocorrer uma redução maciça das emissões e quanto podem custar. Se o objectivo for limitar o aquecimento do mundo em rápido desenvolvimento e sem limitações de carbono, como é actualmente o caso, a 2°C, o investimento cumulativo em energia terá que aumentar significativamente. (adaptado de *Nature News* de 11 de Janeiro).

2. AQUECIMENTO GLOBAL E ALTERAÇÕES CLIMÁTICAS

O efeito de estufa, consistindo na retenção pelos gases da atmosfera (como dióxido de carbono e metano, principalmente) do calor (radiação infravermelha) que se gera na superfície da Terra a partir da radiação recebida do Sol, está na origem da relativamente pequena amplitude térmica diária à superfície da Terra, tornando possível o desenvolvimento da vida, como a conhecemos. O que actualmente se discute é o efeito da acumulação de gases absorvedores de radiação infravermelha na atmosfera (o que exclui os seus maiores constituintes, azoto e oxigénio), que podem estar a conduzir a um aumento da temperatura média e, conseqüentemente, a uma alteração dos equilíbrios atmosféricos existentes há milhares de anos atrás, em particular, até ao início da revolução industrial (séc. XVIII).



Sources: Oitanagan university college in Canada, Department of geography, University of Oxford, school of geography, United States Environmental Protection Agency (EPA), Washington; Climate change 1995, The science of climate change, contribution of working group 1 to the second assessment report of the intergovernmental panel on climate change, UNEP and WMO, Cambridge university press, 1996.

Figura 1 O efeito de estufa (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/greenhouse-effect>)

Em 1895, o cientista sueco Arrhenius, recorrendo a conceitos físicos básicos conseguiu perceber de que forma variações da concentração de gases na atmosfera, em particular do dióxido de carbono, afectavam o balanço de calor na Terra. Estabelecendo uma correlação entre elevadas concentrações de dióxido de carbono na atmosfera e temperaturas atmosféricas mais elevadas, Arrhenius estabeleceu os fundamentos da investigação actual em alterações climáticas, a qual é dominada pela compreensão de que/ se um aumento contínuo da concentração de CO₂ atmosférico, provocado essencialmente pela queima de com-

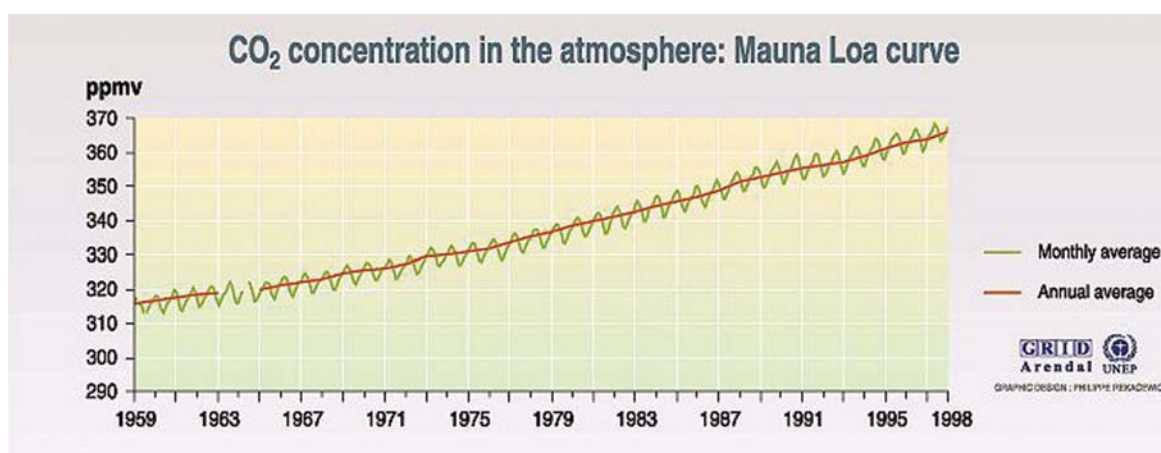
bustíveis fósseis, é a razão principal pela qual o clima mundial está a aquecer tanto e tão rapidamente.

Apesar de a maioria dos cientistas que estudam o clima considerarem que o aquecimento global é de origem antropogénica, há no entanto outros que argumentam que não existe uma base científica suficiente que suporte essa conclusão.

Os factos indesmentíveis são que a concentração de dióxido de carbono atmosférico tem aumentado desde que a Revolução Industrial começou em 1700s, com o aumento mais signifi-

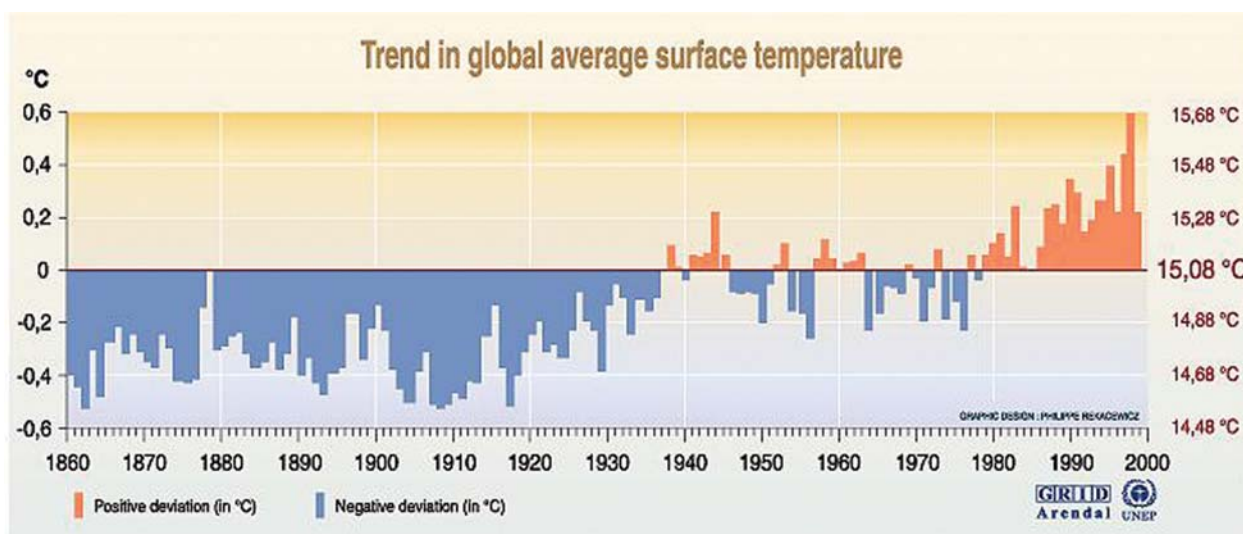
cativo desde 1950; que este aumento é essencialmente devido à queima de combustíveis fósseis; que a temperatura global média tem aumentado desde 1850, com o aumento mais significativo desde 1970.

Há também dados que mostram uma correlação entre a concentração de CO₂ atmosférico e a temperatura média global. Contudo, a unanimidade termina aqui. A questão central do debate reside na causa do aquecimento: se este resulta do aumento do nível de CO₂ antropogénico ou se é apenas o resultado da variabilidade do clima natural da Terra.



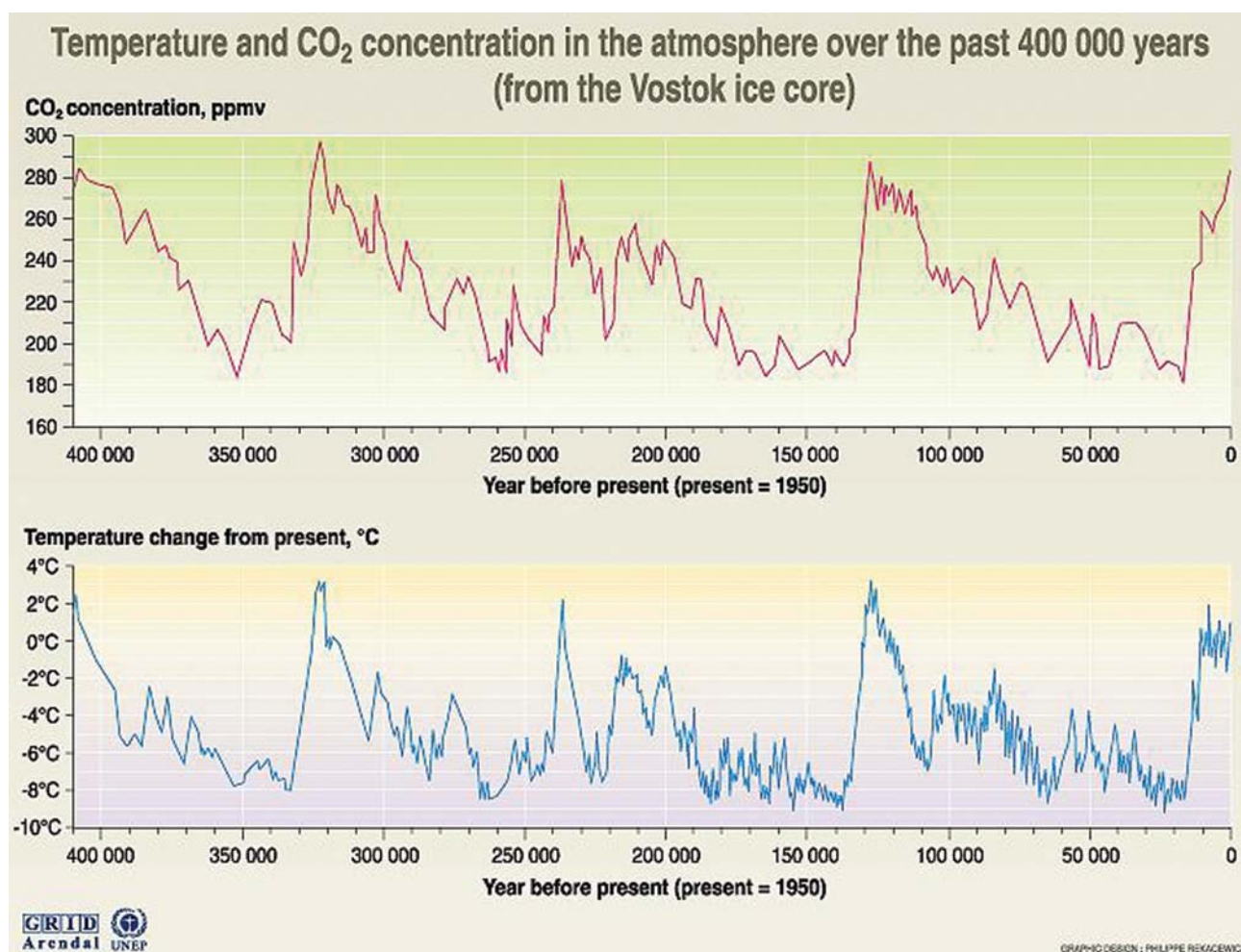
Source : Scripps Institution of oceanography (SIO), University of California, 1998.

Figura 2 Evolução da concentração de CO₂ na atmosfera (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/co2-concentration-in-the-atmosphere-1959-1998>)



Source: School of environmental sciences, climatic research unit, university of East Anglia, Norwich, United Kingdom, 1999.

Figura 3 Evolução da temperatura global média (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/trends-in-global-temperatures>)



Source: J.R. Petit, J. Jouzel, et al. Climate and atmospheric history of the past 420 000 years from the Vostok ice core in Antarctica, *Nature* 399 (3/June), pp 429-436, 1999.

Figura 4 Correlação entre a variação da temperatura e a variação da concentração de CO₂ nos últimos 400000 anos (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/temperature-and-co2-concentration-in-the-atmosphere-over-the-past-400-000-years>)

A opinião maioritária é a veiculada por relatórios divulgados nos últimos 20 anos pelo IPCC (*Intergovernmental Panel on Climate Change*), uma entidade criada pelas Nações Unidas, segundo a qual “o aquecimento do sistema climático é inequívoco, dado que há evidências para um aumento da temperatura global média do ar e dos oceanos, vasto degelo de neve e gelo, e um aumento global médio do nível do mar”. Além disso, atribui a maior contribuição para o aquecimento verificado desde meados do século XX, com probabilidade de 90%, à actividade antropogénica. Os cépticos consideram que os 10% de probabilidade restante não é desprezável, apontando, pelo contrário, para que tais alterações de temperatura resultem de variabilidade climática natural. Estes agrupam-se em “negadores das alterações climáticas”, que acreditam que o período de aquecimento actual é apenas uma fase das variações

de temperatura média da Terra e que o sistema climático é insensível às emissões de gases de efeito de estufa resultantes da actividade humana, e um segundo grupo que não concorda com a totalidade das conclusões do IPCC, duvidando que as alterações possam ser integralmente atribuídas a efeitos antropogénicos.

A teoria do clima baseia-se no pressuposto de que a Terra mantém um equilíbrio entre a energia solar que recebe sob a forma de radiação ultravioleta e luz visível que absorve e a quantidade de calor, sob a forma de radiação infravermelha, que reenvia para o espaço. De entre os factores que podem alterar este balanço, o dióxido de carbono é o único que está a variar significativamente. O CO₂ atmosférico aumentou de cerca de 280 ppmv em 1750 para cerca de 380 ppmv hoje e o IPCC afirma que este aumento excede o intervalo natural de 180-300

ppmv, obtido por medidas em bolhas de ar retidas em gelo que datam de até há 800000 anos atrás. Além disso, a taxa de crescimento do CO₂ reflecte apenas 55% das emissões estimadas como resultado da actividade humana, o que significa que a natureza sequestra actualmente cerca de metade do CO₂ gerado pelos humanos. Contudo, de acordo com um estudo recente, a capacidade natural da Terra para sequestrar o CO₂ parece estar a diminuir.

É de referir no entanto que todas as moléculas presentes na atmosfera que absorvem radiação infravermelha contribuem para o efeito de estufa. A cada molécula é atribuído um potencial de aquecimento global. Assim, para o CO₂, que serve de padrão, o potencial é de uma molécula ao longo de 100 anos. Para o metano o potencial de aquecimento é de 21, sendo 310 para N₂O e 23900 para SF₆.

The main greenhouse gases

Greenhouse gases	Chemical formula	Pre-industrial concentration	Concentration in 1994	Atmospheric lifetime (years)***	Anthropogenic sources	Global warming potential (GWP) *
Carbon-dioxide	CO ₂	280 ppmv	358 ppmv	50-200	Fossil fuel combustion Land use conversion Cement production	1
Methane	CH ₄	700 ppbv	1720 ppmv	12-17	Fossil fuels Rice paddies Waste dumps Livestock	21 **
Nitrous oxide	N ₂ O	275 ppbv	312 ppmv	120-150	Fertilizer industrial processes combustion	310
CFCs	CFC12	0	503 pptv	102	Liquid coolants. Foams	125-152
HCFCs	HCFC-22	0	105 pptv	13	Liquid coolants	125
Perfluorocarbon	CF ₄	0	110 pptv	50 000	Production of aluminium	6 500
Sulphur hexa-fluoride	SF ₆	0	72 pptv	1 000	Production of magnesium	23 900

Note : pptv= 1 part per trillion by volume; ppbv= 1 part per billion by volume, ppmv= 1 part per million by volume

* GWP for 100 year time horizon. ** Includes indirect effects of tropospheric ozone production and stratospheric water vapour production. *** On page 15 of the IPCC SAR. No single lifetime for CO₂ can be defined because of the different rates of uptake by different sink processes.



Source: IPCC radiative forcing report ; Climate change 1995, The science of climate change, contribution of working group 1 to the second assessment report of the intergovernmental panel on climate change, UNEP and WMO, Cambridge press university, 1996.

Figura 5 Principais gases de efeito de estufa (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/main-greenhouse-gases>)

O vapor de água é o gás de efeito de estufa mais abundante e influente. Contudo este não é considerado como um factor contribuindo directamente para o aquecimento global, sendo o seu efeito considerado como “feedback” nos modelos climáticos. Na globalidade, o vapor de água e as nuvens são responsáveis por 60% do efeito de estufa, seguindo-se o CO₂ com cerca de 26% e depois, com pequenas contribuições, metano, ozono e outros gases. Na ausência de aquecimento por efeito de estufa natural a temperatura média da Terra seria de -18 °C. Este efeito de estufa natural aumenta a temperatura para cerca de 33°C.

Os cientistas que investigam o clima dependem de medidas de temperatura, à superfície ou medidas com satélites, para as suas previsões. Contudo, as condições em que estas medidas são efectuadas têm sido alvo de controvérsia.

Refira-se no entanto que, mais do que as medidas absolutas, o que mais

interessa os cientistas são as variações. Para estudar períodos de tempo longos, os cientistas recorrem a registos históricos e dados recolhidos de gelo, anéis das árvores e sedimentos marítimos, o que lhes permite recuar no tempo. Mas também estes estudos são pontos quentes de debate sobre as alterações climáticas.

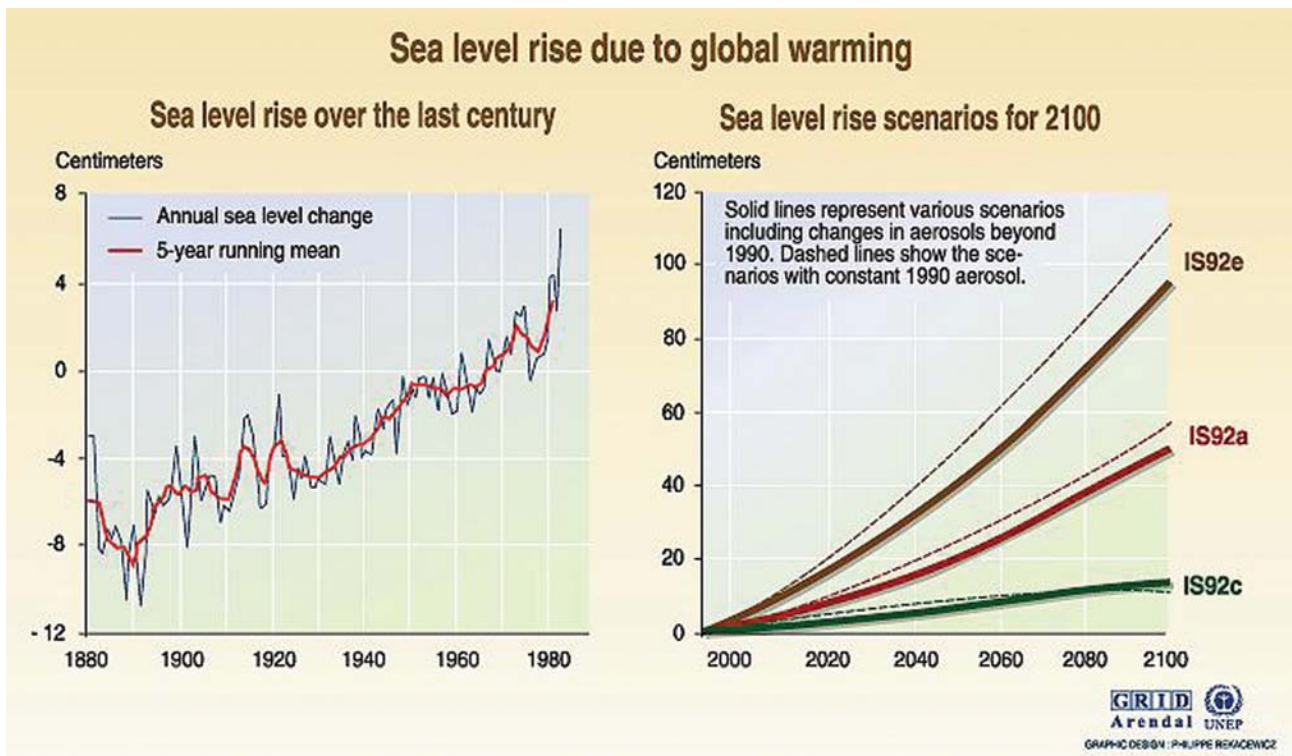
O facto de quer a temperatura quer a concentração de CO₂ terem valores mais altos e mais baixos (ver Fig. 4) do que hoje é usado para fundamentar que a variabilidade natural do clima é a norma e que o impacto da actividade humana não é identificável, ou seja, que há um aquecimento pequeno ou mesmo nulo resultante da actividade antropogénica.

A disputa permanece activa. Havendo uma só Terra para estudar, o IPCC usou 18 modelos diferentes para estabelecer as suas conclusões, o que levou a vários resultados. Verificaram que se os efeitos da actividade antropogénica não fossem incluídos nesses modelos não se conseguia obter

a tendência de variação da temperatura observada. Contudo, os cépticos argumentam que se trata afinal da escolha de parâmetros que se ajustam às variações observadas!

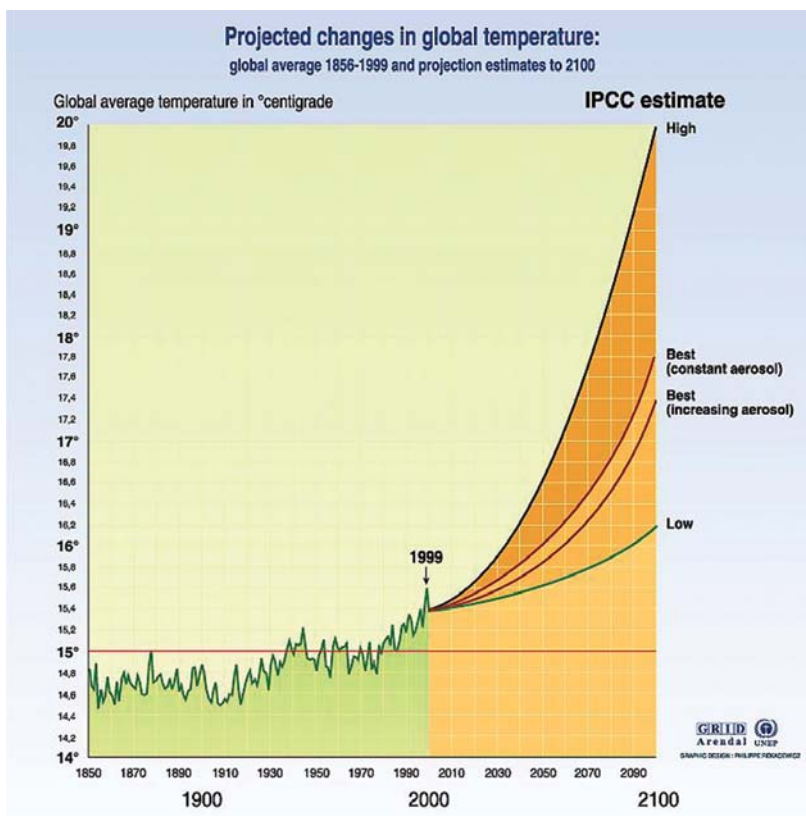
A figura 4 mostra que, nos últimos 400000 anos, as alterações de temperatura anteciparam as alterações da concentração de CO₂. Contudo, nos últimos 100 anos esta relação foi alterada, dado que as alterações da concentração de CO₂ precederam as alterações de temperatura. Enquanto prova do efeito da actividade antropogénica, este argumento não é contudo consensual.

Em conclusão, apesar da controvérsia, a posição maioritária parece ser, no entanto, a de que o conjunto dos dados recolhidos constitui uma prova avassaladora da influência da actividade humana nas alterações climáticas, embora existam ainda incertezas em relação às previsões das consequências futuras.



Source: Climate change 1995, The science of climate change, contribution of working group 1 to the second assessment report of the intergovernmental panel on climate change, UNEP and WMO, Cambridge university press, 1995; Sea level rise over the last century, adapted from Gornitz and Lebedeff, 1987.

Figura 6 Previsões de evolução do nível do mar (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/sea-level-rise-due-past-and-scenarios-due-to-global-warming>)



Source : Temperatures 1856 - 1999, Climate Research Unit, University at East Anglia, Norwich UK. Projections: IPCC report 95.

Figura 7 Previsões de evolução da temperatura global média (fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/temperature-trends-and-projections1>)

3. CAPTURA E RETENÇÃO DE CARBONO

Sendo o dióxido de carbono apontado como o principal causador do aqueci-

mento global, estão em estudo várias estratégias para reduzir a sua concentração na atmosfera, através da sua captura e retenção ou armazenamen-

to e do desenvolvimento de processos em que a sua produção seja minimizada. No número de 25 de Setembro a revista *Science* fez um apanhado das ideias e esforços em desenvolvimento para capturar e armazenar o dióxido de carbono.

Claro que, se for química e tecnologicamente viável a utilização de dióxido de carbono como matéria-prima, poderemos encontrar uma solução útil para o excesso de dióxido de carbono. Apesar de haver estudos em curso, em particular sobre catalisadores que possam promover essa transformação, a tarefa não se apresenta fácil (mesmo do ponto de vista termodinâmico). É apresentado um limite de aumento de temperatura de 2°C em relação à época que precedeu a Revolução Industrial. As previsões das alterações climáticas indicam que é necessário atingir uma redução do CO₂ antes de 2020.

De facto, na Conferência do Clima das Nações Unidas de 2007 em Bali houve vários apelos para que se reduzam em 50% as emissões globais de gases de efeito de estufa até 2050, para que se evite um aumento que ultrapasse o limite de 2°C.

A decisão de limitar o aumento de temperatura a 2°C é essencialmente de natureza política. Segundo alguns modelos, uma concentração de dióxido de carbono equivalente, CO₂e (que reflecte o efeito dos vários gases de efeito de estufa, para além do CO₂) de 550 ppmv (partes por milhão em volume) sugere 82% de probabilidade de ultrapassar o limite de 2°C, enquanto que para se conseguir 93% de probabilidades de não se ultrapassar esse limite, é necessário limitar a concentração de CO₂e a 350 ppmv, ou seja, abaixo dos níveis actuais. Assim, há quem sugira um limite mais realista de aumento de 4°C, o qual, mesmo assim, só será conseguido com uma rápida acção.

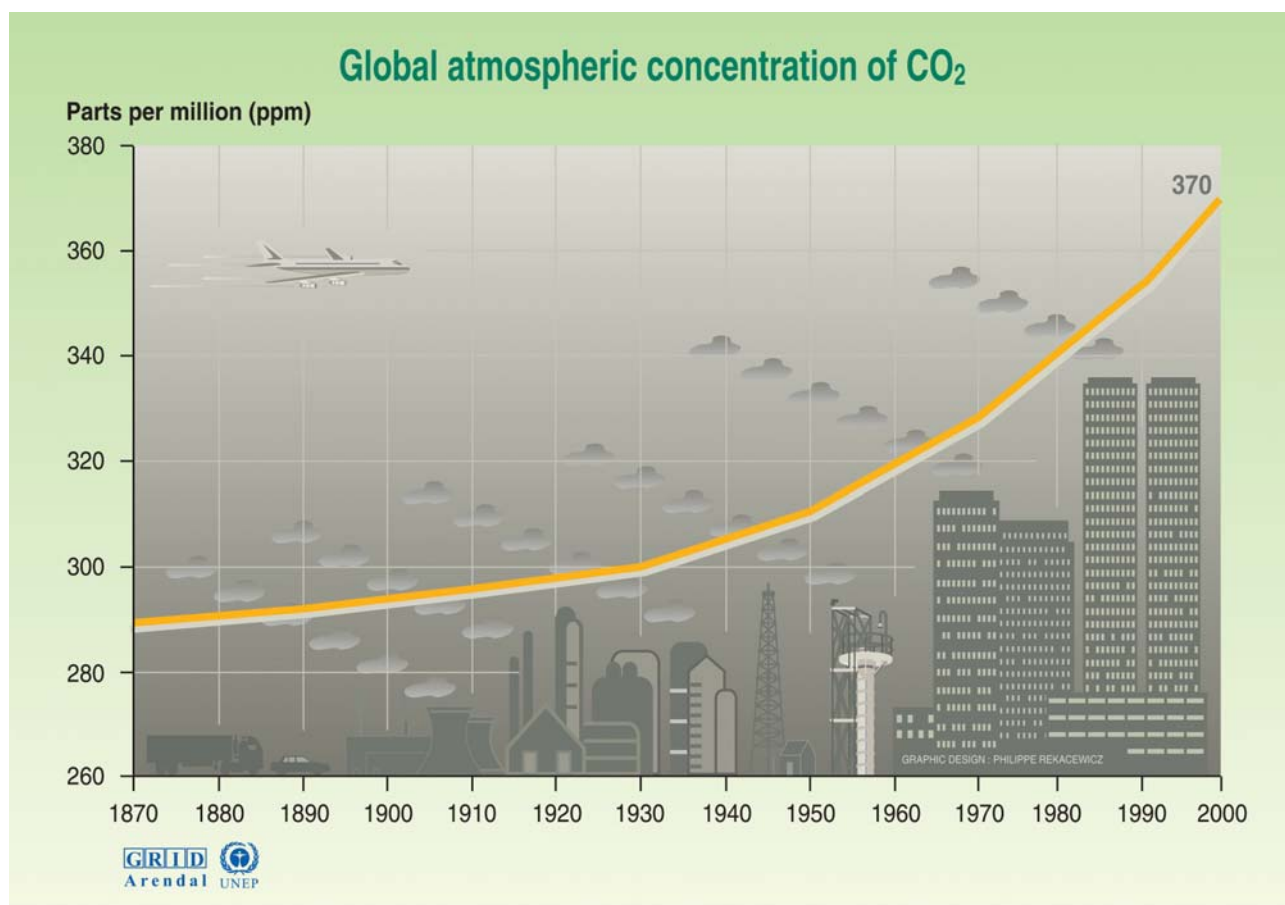
A concentração actual de CO₂ é de cerca 380 ppmv, e a concentração de

CO₂e é de cerca de 455 ppmv. Muitos cientistas acreditam que 450 ppmv é a concentração máxima que podemos permitir se queremos evitar uma perturbação do clima.

SOBRE O CICLO DO CARBONO

O carbono circula através das criaturas vivas, da atmosfera, oceanos e a própria Terra, num balanço impressionante. A fixação do carbono pelos organismos terrestres e marítimos ocorre através da fotossíntese. Os animais consomem outros organismos e queimam carbo-hidratos para obterem energia, libertando CO₂ através da respiração e por decomposição após a sua morte. Ao longo de períodos de tempo mais longos do que a presença dos humanos, a formação de carbono igualou sensivelmente o seu consu-

mo. A adição de CO₂ pelos humanos através da queima de combustíveis fósseis veio alterar este equilíbrio. CO₂ é absorvido pelas águas frias dos oceanos e as correntes frias a latitudes elevadas transportam o dióxido de carbono dissolvido para as profundezas dos oceanos. Reaparece na região dos trópicos à superfície dos oceanos, passando das águas quentes para a atmosfera. O fitoplâncton absorve parte desse CO₂ através da fotossíntese, formando o primeiro elo de ligação com a cadeia alimentar marinha. Pequenas quantidades de carbono são depositadas no fundo dos mares, através dos dejectos e dos organismos mortos. Deste processo resulta uma pequena retenção de carbono nos sedimentos oceânicos.



as: TP Whorf Scripps, Mauna Loa Observatory, Hawaii, institution of oceanography (SIO), university of California La Jolla, California, United States, 1999

Figura 8 Variação da concentração global de CO₂ atmosférico desde 1870 a 2000 em ppmv
(fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/global-atmospheric-concentration-of-co2>)

Em termos do balanço de carbono (em gigatoneladas por ano):

Depósitos de carbono:

Produção de vegetação: 57
Absorção pelos oceanos: 92,2
Depósitos terrestres: 2,3

Fontes de carbono:

Respiração da vegetação: 55,5
Libertação a partir dos oceanos: 90,5
Emissões por queima de combustíveis fósseis (e produção de cimento): 6,4 ano
Alterações na utilização das terras: 1,2

de que resulta um balanço anual positivo de 2,1 gigatoneladas.

A quantidade de CO₂ na atmosfera tem variado significativamente ao longo da história da Terra, em resultado dos efeitos das idades do gelo, vulcanismo, impacto de asteróides e variações da superfície coberta por vegetação.

Há cerca de 500 milhões de anos, a concentração de CO₂ na atmosfera pode ter sido cerca de 20 vezes mais elevada do que a actual. Nos últimos 10000 anos a concentração de CO₂ tem sido de cerca de 280 partes por milhão, em volume (ppmv) com excepção do aumento que se iniciou

com a Revolução Industrial que a elevou para cerca de 380 ppmv.

Refira-se que estudos mais recentes (Tripathi et al., *Science* **326** (2009) 1394) conseguem estimar a concentração de CO₂ na atmosfera até há cerca de 20 milhões de anos. Nos últimos 800000 anos, a concentração de CO₂ tem oscilado entre ~180 e ~280 ppmv, estando estas oscilações correlacionadas com as oscilações da temperatura e do nível dos oceanos. Estes estudos mais recentes mostram que no Mioceno médio (14 a 10 milhões e anos atrás) (em que as temperaturas à superfície da Terra eram cerca de 3 a 6 °C mais elevadas e o nível do mar 25 a 40 m mais elevado que actualmente) a concentração de CO₂ na atmosfera era idêntica à actual. Durante o Mioceno médio e Plioceno “tardio” (~3,3 a 2,4 milhões de anos) as reduções da concentração de CO₂ coincidiram com a expansão glacial.

Há acordo em relação ao aumento da quantidade de CO₂ na atmosfera, mas as opiniões divergem quanto ao seu efeito sobre o aumento médio da temperatura da atmosfera terrestre. Estas previsões baseiam-se em modelos, em relação aos quais surgem vozes discordantes, também porque a escala de tempo habitualmente usada é pequena à escala geológica e

porque não é seguro que tenham em conta todos os intervenientes no ciclo do carbono.

SEQUESTRAÇÃO DE CARBONO

Uma das abordagens em desenvolvimento para abrandar o aumento da concentração de CO₂ na atmosfera consiste na captação e armazenamento de carbono. Actualmente há alguns projectos em desenvolvimento. A maioria tem por objectivo enterrar o CO₂ separado do gás natural ou injectá-lo nos reservatórios de petróleo, usando-o para a extracção do petróleo. Há projectos destes em curso ou projectados nos EUA, na Europa, em África (Argélia), na China e Austrália. Em particular, os produtores de gás natural estão a injectar o CO₂ comprimido, que separam do gás natural, em depósitos cheios de água e em camadas geológicas a grande profundidade, ou em depósitos de gás natural já esgotados. Há também projectos para reutilização do CO₂ proveniente do carvão natural na produção de bebidas gaseificadas.

CARBONO PROVENIENTE DA QUEIMA DOS COMBUSTÍVEIS FÓSSEIS

O carbono resultante da combustão dos combustíveis fósseis é um dos principais contribuintes para as alterações climáticas. Daí que a captura e armazenamento do carbono envolvido nesta combustão assuma uma grande importância. Contudo, se esta necessidade envolve já um alargado consenso, não é claro que o investimento neste processo seja suficiente. O preço dos combustíveis não tem em conta o preço das emissões do CO₂ e, por isso, se os custos de captura e armazenamento fossem reflectidos nesses preços, eles aumentariam e assim os preços de toda a energia consumida. A combustão de combustíveis fósseis satisfaz cerca de 85% da energia utilizada na actividade industrial.

Para que esta ideia seja implementada são pois necessários investimentos significativos, o que, numa economia de mercado, implica o seu retorno.

Actualmente estão em desenvolvimento três métodos de captura do CO₂ provenientes dos combustíveis

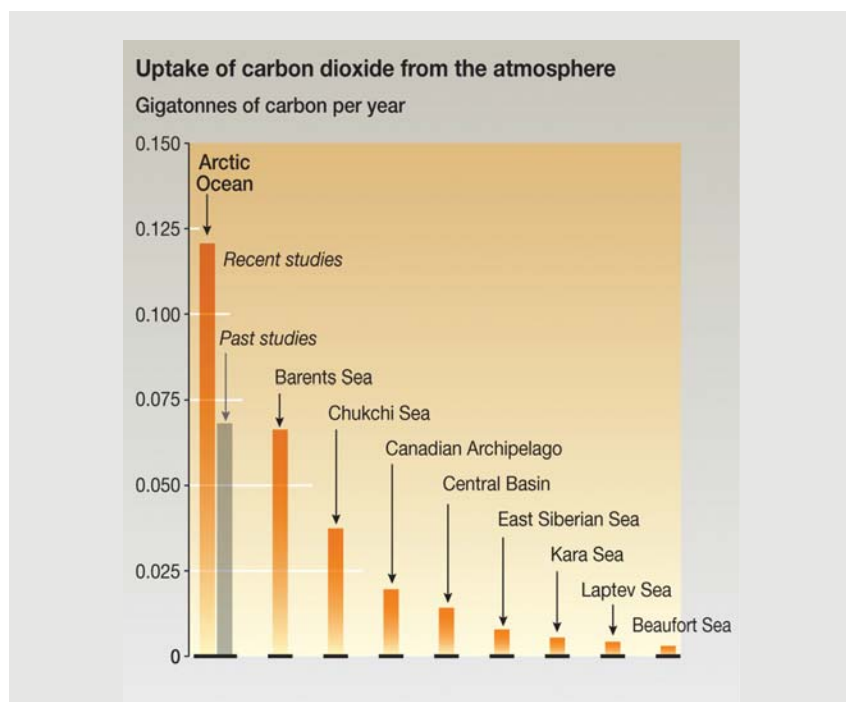


Figura 9 Captura do CO₂ atmosférico pelos mares

(fonte: <http://maps.grida.no/go/graphic/uptake-of-carbon-dioxide-from-the-atmosphere1>)

fósseis: pós-combustão, pré-combustão e combustão de *oxicombustível*. A captura pós-combustão consiste na captura do CO₂ com solventes adequados (aminas); na pré-combustão, remove-se o carbono deixando apenas hidrogénio para queimar; a combustão de *oxicombustível* queima carvão ou gás em ar sem azoto, libertando-se apenas CO₂ e água.

Após a combustão, o CO₂ é capturado e pressurizado até 70 bar, formando um líquido que pode ser transportado até ao local de armazenamento.

A separação do carbono é o processo que consome mais energia e resulta num maior custo. No caso da pós-combustão, um solvente absorve o CO₂, sendo depois regenerado. Estão em estudo aminas como solventes para esta retenção.

Esta técnica baseia-se num processo patenteado em 1930, em que se usam soluções aquosas de uma amina de baixa volatilidade para absorver o CO₂. A utilização de técnicas criogénicas tem também sido proposta.

A combustão de *oxicombustível* não foi ainda desenvolvida para grandes instalações. Este método, em que se usa oxigénio criogenicamente separado do ar, permite uma separação mais fácil do CO₂, sem solvente. A captura na pré-combustão envolve a gaseificação do carvão ou a transformação química do gás em hidrogénio.

O transporte do CO₂ envolve também alguns desafios tecnológicos e comerciais. Tem sido transportado em conduta, mas o material da sua construção tem que ser adequado às

características do CO₂, nomeadamente, em relação à quantidade de vapor de água e impurezas (como O₂, N₂ ou SO₃) presentes.

Finalmente, a injeção do carbono e o seu armazenamento geológico, têm que ter em conta a deslocação de fluidos, o arrefecimento que acompanha a sua expansão e que pode resultar na formação de gelo que impede a propagação do CO₂ nos depósitos/reservatórios ou pode provocar a fractura térmica de placas geológicas que confinam o gás.

Embora haja várias instalações experimentais e piloto em funcionamento, não há ainda nenhuma instalação de captura e retenção de carbono a funcionar em pleno.

A sua implementação tem que passar ainda por alguns estágios de desenvolvimento para grandes escalas, sendo que se aspira a que haja instalações comerciais a funcionar em 2015, antes do “prazo limite do clima” de 2020, para evitar que se ultrapasse o ponto de previsibilidade do clima. Para tal são necessários financiamento e a construção de projectos reais urgentes.

CAPTURA DO CO₂ ATMOSFÉRICO

As tecnologias acima mencionadas têm por objectivo reduzir a emissão de CO₂. Contudo, não podem reduzir (directamente) a sua concentração atmosférica actual nem eliminar os riscos climáticos que daqui derivam. É assim importante conseguirmos reduzir a concentração de dióxido de carbono atmosférico, de uma forma mais rápida do que a natureza consegue.

A atmosfera actual contém cerca de 380 ppmv de CO₂ (fracção molar: 0,00314 ou 0,038% em volume). Sendo esta uma concentração “muito baixa”, torna difícil a sua remoção e, por outro lado, é necessário movimentar enormes quantidades de ar. Este é pois um processo mais oneroso do que a captura do CO₂ a partir dos gases de combustão, por exemplo. Por isso, de momento, apenas em nichos de actividade muito específicos (produção de energia ou actividade tecnológica) poderá ser economicamente viável a captura do dióxido de carbono atmosférico.

A investigação actual centra-se num pequeno número de grupos académicos e pequenas “start-ups”.

A captura pode usar um sistema de absorção sólido (como membranas de permuta iónica ou aminas sólidas) ou líquido (uso de soluções aquosas alcalinas).

Há investidores que acreditam que é possível desenvolver tecnologias competitivas para este fim, que é um dos poucos que permite emissões globais negativas de CO₂.

(Adaptado de: Science 325 (2009) 1641. Fontes adicionais: Tripathi et al., Science 326 (2009) 1394; Anderson e Bows, Phil. Trans. R. Soc. A 366 (2008) 3863, C&EN 87 (2009)11; Figuras retiradas de <http://maps.grida.no/go/collection/vital-climate-graphics>)

Jorge Morgado

Images: © Stadt Nürnberg, Privatbild der BASF SE, Stearn

3rd EuChemS Chemistry Congress

Chemistry – the Creative Force



29.08. – 02.09.2010 · NÜRNBERG · GERMANY

Topics

Innovative Materials
Resources and Environment
Supramolecular Systems
Catalysis
Molecular Life Sciences
Analysis, Manipulation and Simulation
Advances in Organic and Inorganic Chemistry



Chairmen

François Diederich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich/CH
Andreas Hirsch
University Erlangen-Nuremberg/D



www.euchems-congress2010.org

Contact: Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
Congress Team
P.O. Box 90 04 40
60444 Frankfurt am Main - Germany
Phone: +49 69 7917-358/-366
E-mail: euchems-congress2010@gdch.de

CALL FOR PAPERS

SUBMIT YOUR ABSTRACT NOW

www.euchems-congress2010.org/abstracts.htm

Impact at the Interfaces

Sister Journals of *Angewandte Chemie*
(Impact Factor 2006: 10.232)
Published on behalf of
The Editorial Union of Chemical
Societies (EUChemSoc)



Since 2000
**Where Chemistry
Meets Life Science**

ChemBioChem

Impact Factor
(2006): 4.100

For more information,
please visit
www.ChemBioChem.org

Since 2000
**A Successful
Concept**

ChemPhysChem

Impact Factor
(2006): 3.449

For more information,
please visit
www.ChemPhysChem.org



Since 2006
**Chemistry
Enabling Drug
Discovery**

ChemMedChem

For more information,
please visit
www.ChemMedChem.org

Coming Soon in 2008
**Chemistry
& Sustainability
Energy & Materials**

ChemSusChem

For more information,
please visit
www.ChemSusChem.org



Subscribe now!

cs-journals@wiley.com (USA/Canada)
service@wiley-vch.de (Germany/Austria/Switzerland)
cs-journals@wiley.co.uk (all other areas)



EUChemSoc



37360708_gu

QUE É FEITO DA REVISTA PORTUGUESA DE QUÍMICA?

JOÃO ROCHA*

A Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) tem uma longa tradição de publicações científicas próprias.

Na forma que conhecemos hoje, a publicação de revistas pelas sociedades científicas tem uma história relativamente curta, com início no século 19. Nessa época, o Inglês não era a única língua da química: o Francês e o Alemão eram igualmente importantes. Mas no final do século 20, a importância do Inglês era tal que os autores que desejavam ter um papel activo nas descobertas científicas mais importantes se viam obrigados a publicar nesta língua. A revista da SPQ, escrita em Português durante muito anos, era um veículo importante a nível nacional. Na sua fase final foi publicada em Inglês, mas a sua reduzida divulgação a nível internacional, bem como a frequência espaçada, tornavam difícil aos seus editores atrair os melhores trabalhos nacionais.

As Sociedades de Química da Europa continental invejavam o espectro de revistas da *American Chemical Society (ACS)* e da *Royal Society of Chemistry (RSC)*, reconhecendo a vantagem que estas sociedades tinham devido ao facto da sua língua nativa ser o Inglês. No continente, a maioria das revistas de sociedade publicava sobretudo artigos de química orgânica tradicional e, em menor escala, de química inorgânica. Respondendo à tendência para assumir o Inglês como a língua franca da Ciência, as sociedades europeias de Química começaram a discutir formas de unir e concentrar a sua capacidade editorial, tendo em vista divulgar, em revistas feitas na Europa, a investigação realizada nos seus países e recolher, assim, os benefícios devidos à excelência dos seus programas de química e à investigação dos seus membros.

A ideia não era inteiramente nova; no século 19 as tentativas de união não foram, porém, bem sucedidas. Os químicos estavam bem à frente da sua época! Com a construção da União Europeia, o clima tornou-se propício ao sucesso. Além disso, o potencial da Europa é impressionante (ver, na Figura 1, dados relativos a 2008).

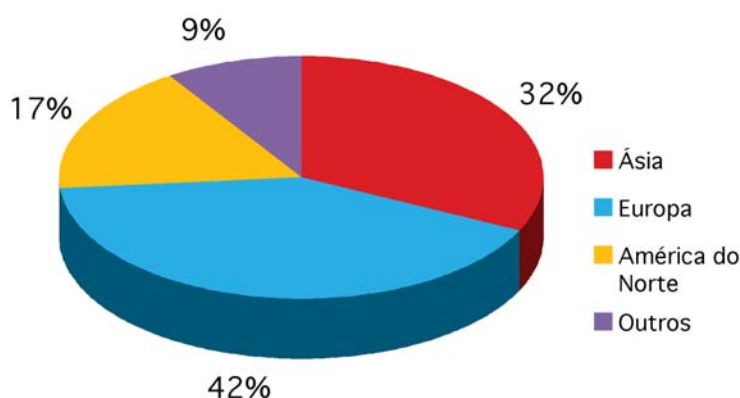


Figura 1 Capacidade editorial da Europa. (Fonte: Todas as categorias de química ISI, incluindo engenharia química e cristalografia em 2007. Todos os países dos autores de uma determinada publicação são contados uma vez, ou seja, quando autores de dois países diferentes colaboram ambos são contados uma única vez. O número total atribuído é 167.000, apesar de um menor número de trabalhos ter sido publicado.)

A visão de ter menos revistas mas de melhor qualidade e de estreitar a cooperação entre as sociedades europeias foi plasmada em princípios gerais em 1990. Reconheceu-se desde o início que o pré-requisito para o sucesso era a qualidade, e também que seria necessário alargar-se, antes cedo do que tarde, o âmbito científico das revistas a disciplinas para além da química orgânica e inorgânica.

A implementação do processo de fusão de revistas não foi fácil, uma vez que os membros de cada nacionalidade tinham, justamente, orgulho nas respectivas revistas. Para resolver o problema do Inglês, o conselho editorial deveria, também, prestar atenção às questões de língua.

Desde o início, as sociedades europeias reconheceram que, num contexto de revistas respeitáveis com nomes muito diversos, só era possível uma solução: as revistas emergentes deveriam ter nomes novos.

Além disso, uma distribuição justa dos proveitos da revista tinha de ser acordada, embora países com potencial muito diferente, dada a diferente dimensão das várias comunidades químicas europeias, planeassem cooperar no projecto editorial. Um acordo justo teria de ser unânime.

Novas sociedades europeias ganharam experiência conjunta com a publicação do *Chemistry - A European Journal*, iniciada em 1994. A editora escolhida foi a *Wiley-VCH*, na qual a sociedade alemã de química tinha então acções, e que publicava a prestigiada revista *Angewandte Chemie*. Finalmente, o processo de fusão das revistas científicas nacionais começou em 1995, quando o contrato de *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas* (um jornal da sociedade química holandesa) com a *Elsevier* se aproximava da sua renovação.

Da aproximação entre o *KNCV* e o *GDCh* resultou o nascimento dos conceitos do *European Journal of Inorganic Chemistry (EurJIC)* e do *European Journal of Organic Chemistry (EurJOC)*. Outras sociedades rapidamente seguiram este exemplo. Para colmatar o hiato entre o fim do contrato da *Recueil* e o termo de outros importantes periódicos de sociedades europeias, *Chemische Berichte* e *Lie-*

* CICECO e Departamento de Química
Universidade de Aveiro
3810-193 Aveiro, Portugal
rocha@ua.pt

biggs Annalen foram publicados conjuntamente com a *Recueil* em 1997. Os novos nomes das revistas foram utilizados pela primeira vez em 1998. Uma capa de design moderno, com fotos de rosto e as siglas *EurJIC* e *EurJOC*, foi introduzida em 2002.

Um dos pré-requisitos para a inclusão no projecto de uma dada sociedade era a cessação de uma revista. Os dividendos eram distribuídos pelos países proprietários de acordo com o número de trabalhos publicados por investigadores afiliados a cada país. Assim, quanto mais Portugal publicar, maior será o benefício financeiro para a SPQ.

A família de revistas europeias cresceu rapidamente vindo a incluir, em 2000, revistas interdisciplinares. Nesta altura, a colaboração entre as sociedades era já tão sólida que se decidiu encontrar um nome para este esforço conjunto. A União Editorial de Sociedades de Química de 2002, assumiu-se em 2008 como a Sociedade Química Editorial da Europa (*ChemPubSoc Europe*), compreendendo as sociedades da Áustria, Bélgica (duas sociedades), República Checa, França, Alemanha, Grécia, Hungria, Itália, Holanda, Polónia, Portugal, Espanha e Suécia. Apenas quatro países não fundiram, ainda, os seus jornais.

A Polónia, no entanto, irá dar esse passo em 2010. Para permitir que a Áustria, a República Checa e a Suécia beneficiem da sua participação na *ChemPubSoc Europe*, também para o *EurJIC* e o *EurJOC*, foi criado em 2002 o estatuto de “membro associado”, que lhes atribui uma fracção menor das *royalties*, mas que também considera os artigos publicados a partir dos seus países. A “*Chemistree*” das revistas da *ChemPubSoc Europe* revelou-se uma fonte segura de rendimento para as sociedades participantes.

O sucesso do processo de fusão de jornais é patente quando se comparam o número de páginas publicadas e os factores de impacto, antes e depois da fusão (Tabela 1). A união de forças e a criação de meios de publicação mais fortes contribuiu para um claro incremento da qualidade, apesar

de o número total de páginas publicadas ter aumentado.

da *ChemPubSoc Europe*. Sem dúvida, a sua qualidade deve ser melho-

Tabela 1 Comparação das revistas originais com as revistas *ChemPubSoc Europe*

a) Algumas das maiores revistas fundiram-se nas novas publicações periódicas da *ChemPubSoc Europe*; como duas destas revistas não constavam da base de dados ISI, não foram incluídas.

	Último ano de publicação	Últimos factores de impacto	Páginas do último volume
Chem. Ber.	1996	1,774	1 646
Recl. Trav. Chim. Pays-Bas	1996	1,511	548
Liebigs Ann.	1996	1,303	2 216
Gazz. Chim. Ital.	1997	0,891	850
Il Farmaco	2005	0,79	996
Bull. Soc. Chim. Fr.	1997	0,786	1 082
ACH – Models Chem.	2001	0,571	880
Annali di Chimica	2007	0,516	790
Bull. Soc. Chim. Belg.	1997	0,473	836
J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.	1999	0,45	1 634
An. Quim.	1998	0,312	370

Total

11 848

b) Factores de Impacto publicados em Junho de 2009 e número de páginas publicadas nas revistas *ChemPubSoc Europe* em 2008. Os Factores de Impacto de 2008 referem-se ao número médio de citações feitas em 2008 a artigos publicados em 2007 e 2006, podendo apenas ser publicados no ano seguinte.

	Factores de impacto 2008	Páginas 2008
Chem. Eur. J.	5,454	11 724
ChemBioChem	3,322	3 122
ChemMedChem	3,150	2 004
ChemPhysChem	3,636	2 886
ChemSusChem		1 042
Eur. J. Inorg. Chem.	2,694	5 700
Eur. J. Org. Chem.	3,016	6 272

Total

32 750

No entanto, a menos que os melhores trabalhos dos autores das sociedades *ChemPubSoc Europe* seja publicado nestas revistas, elas não traduzirão a real qualidade da investigação europeia. Quando a maioria dos melhores trabalhos é publicada em revistas especializadas que não pertencem à *ChemPubSoc Europe*, gera-se um círculo vicioso, uma vez que o impacto dos jornais é determinado pela qualidade da investigação publicada e os resultados da investigação tendem a ser submetidos para publicação nas revistas de maior impacto.

As revistas interdisciplinares tiveram um começo relativamente bom, tendo sido bem aceites pelas comunidades

rada, mas o problema da aceitação pela comunidade afecta principalmente as disciplinas mais tradicionais da química orgânica e da química inorgânica, áreas onde se deram as fusões. Apresenta-se nas Figuras 2 e 3 (ver página seguinte) o número de artigos publicados pelos países parceiros.

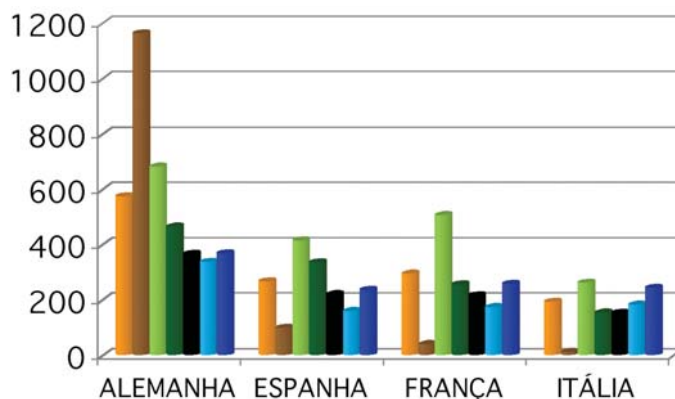
A Figura 4 (ver página seguinte) mostra que os químicos orgânicos e inorgânicos americanos e britânicos apoiam bastante mais os jornais das suas próprias sociedades do que os químicos que trabalham na Europa continental. Considerando todos os químicos que publicam nos jornais da Figura 4, no que concerne à química inorgânica, 75% dos químicos dos EUA publicam

em *Inorganic Chemistry* e em *Organometallics*, 38% dos químicos do Reino Unido publicam na *Dalton*, enquanto que apenas 18% dos químicos da *ChemPubSoc Europe* publicam no

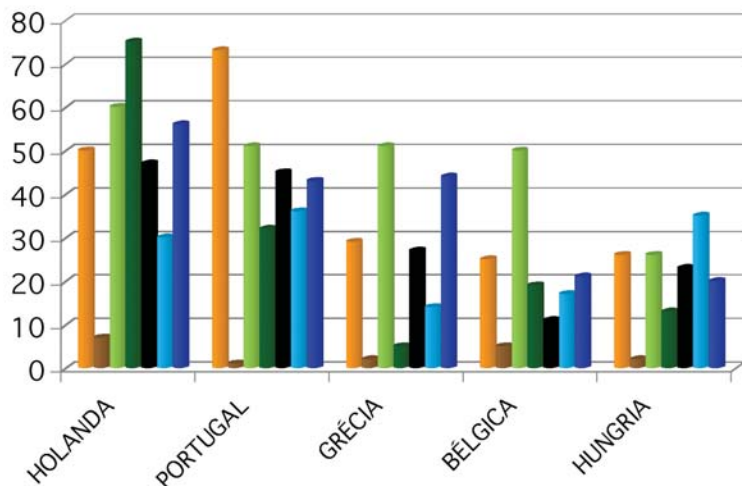
EurJIC. Para a química orgânica, os valores são: 58% dos químicos dos EUA publicam no *Journal of Organic Chemistry* e em *Organic Letters*, 23% dos químicos do Reino Unido publi-

cam em *Organic and Biomolecular Chemistry*, enquanto que apenas 14% dos químicos da *ChemPubSoc Europe* publicam no *EurJOC*.

Países que publicaram mais de 200 artigos no EurJIC



Países que publicaram menos de 100 artigos no EurJIC



Países que publicaram menos de 100 artigos no EurJIC

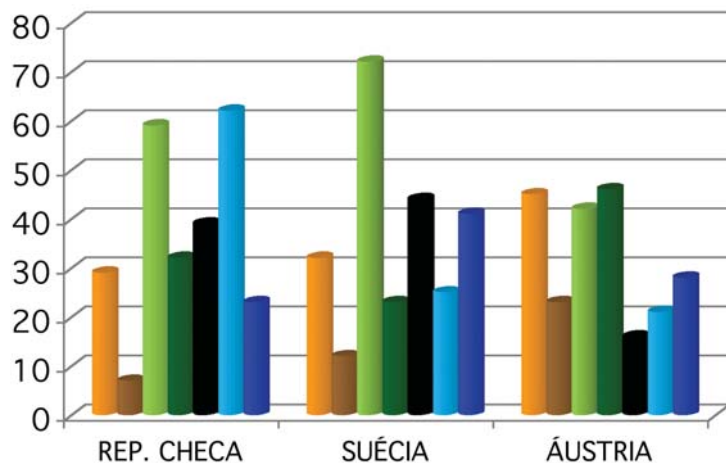
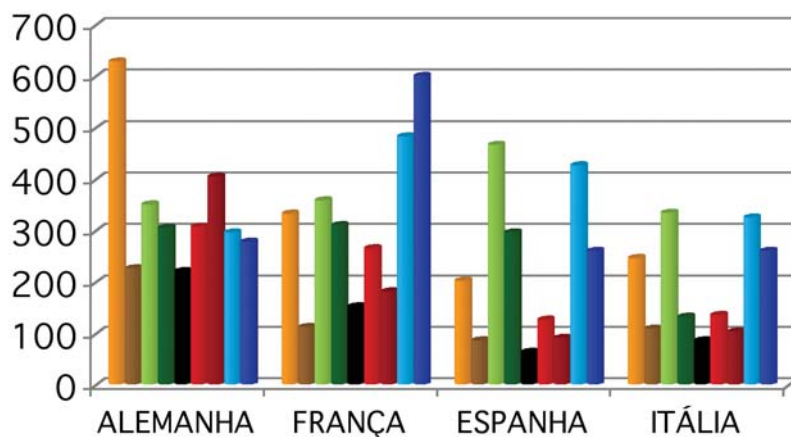
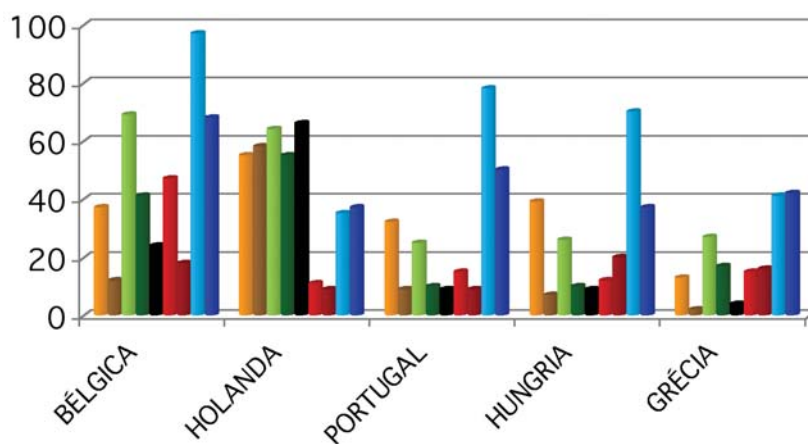


Figura 2 Número de artigos publicados em jornais de química inorgânica pelos países parceiros da *ChemPubSoc Europe*. (Mesma fonte da Figura 1, período 2005 - 2008. Revistas seleccionadas e código de cores: • *EurJIC*; • *ZAAC*; • *Inorg. Chem.*; • *Organometallics*; • *Dalton*; • *J. Organomet. Chem.*; • *Inorg. Chim. Acta*)

Países associados que publicaram mais de 200 artigos no EurJOC



Países associados que publicaram menos de 100 artigos no EurJOC



Países associados que publicaram menos de 100 artigos no EurJOC

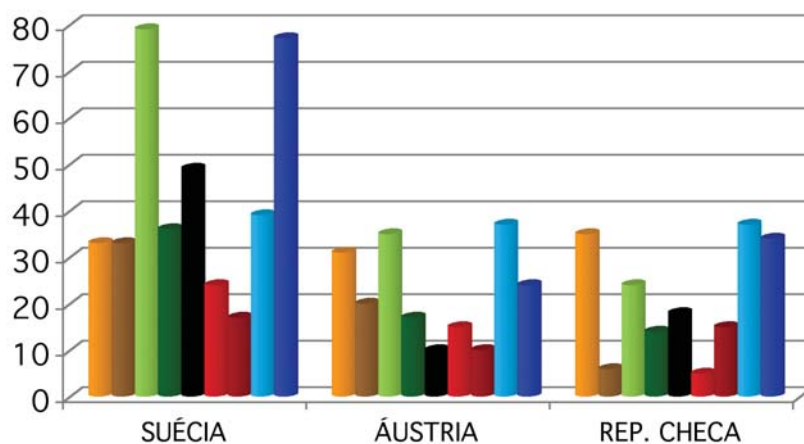


Figura 3 Número de artigos publicados em jornais de química orgânica pelos países parceiros da ChemPubSoc Europe. (Mesma fonte da Figura 1, período 2005 - 2008. Revistas seleccionadas e código de cores: • EurJOC; • ASC; • JOC; • Org. Lett.; • OBC; • Synlett; • Synthesis; • Tetrahedron Lett.; • THL)

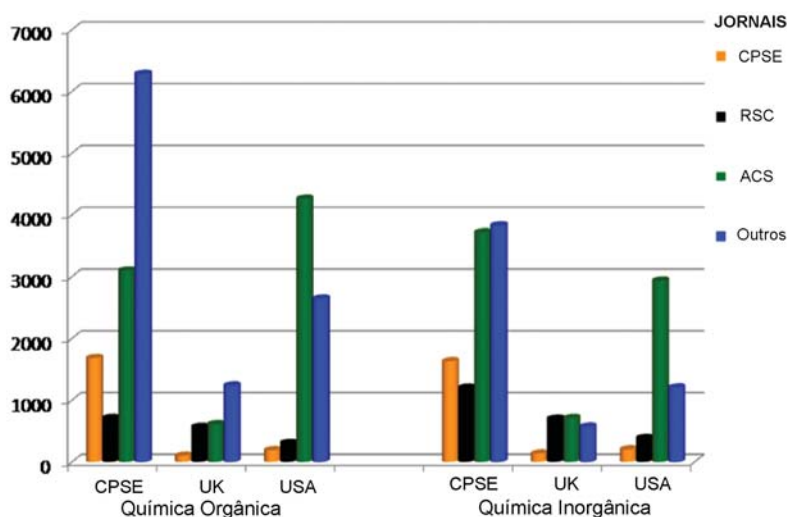


Figura 4 Apoio às revistas das próprias sociedades: o gráfico mostra o número de artigos que os autores da *ChemPubSoc Europe* (CPSE), do Reino Unido (RSC) e dos EUA (ACS) publicam nas revistas das suas sociedades e em outros jornais.

Encorajamos todos vós, e principalmente as comunidades científicas orgânica e inorgânica, a serem agentes activos do desenvolvimento dos jornais da nossa sociedade. Podem ser escolhidos vários caminhos. Os mais óbvios são publicar mais da sua melhor investigação nestes jornais, o que se traduzirá no aumento do número

de trabalhos portugueses, e avaliar os artigos que recebe para rever tendo presente a reputação das suas sociedade e revista.

Além disso, a história dos jornais germinou a partir dos jornais originais das sociedades e a sua estrutura reflecte isto. Todos os grandes países têm um

membro no Conselho Editorial e os países mais pequenos são representados por um membro. O Conselho Editorial reúne-se anualmente com a equipa editorial de Weinheim.

Contacte João Rocha ou o nosso representante na *ChemPubSoc*, Mário Nuno Berberan e Santos, e apresentem-nos as suas sugestões e críticas. Nas conferências, fale com os editores do *EurJIC*, Dra. Karen Hindson (Editor), Dra. Preeti Vashi (Editor Adjunto) e Dra. Arlette Itken-Fuder (Editor Associado), ou com os editores do *EurJOC*, Dr. Haymo Ross (Editor) e Dra. Jenny O'Donnell (Editor sénior associado). As conferências em que estes irão estar presentes são anunciadas na secção de notícias das *homepages* das revistas:

EurJIC,
<http://www3.interscience.wiley.com/journal/27721/home/news/index.html>

EurJOC,
<http://www3.interscience.wiley.com/journal/27380/home/news/index.html>

ACTUALIDADE CIENTÍFICA

ÁGUA NA LUA

Cientistas da NASA anunciaram a descoberta da presença de água na superfície lunar.

De facto, o embate do veículo espacial LCROSS, na cratera Cabeus, perto do pólo sul lunar, confirmou as suspeitas dos investigadores acerca da possibilidade de existência de gelo na superfície da Lua.

Apesar do impacto não ter proporcionado uma nuvem de resíduos visível, os instrumentos do LCROSS possibilitaram a detecção de provas evidentes da presença de água em duas zonas do espectro: infravermelho e ultravioleta. Imediatamente a seguir ao impacto, o espectrómetro de infravermelho identificou características

espectrais específicas da molécula de água e o espectro ultravioleta exibiu um pico acentuado correspondente ao radical hidroxilo, igualmente associado à presença de água.

Estes resultados levaram Anthony Colaprete, investigador da missão LCROSS no NASA Ames Research Center, em Moffett Field, Califórnia, a afirmar que “Foi efectivamente uma detecção forte”.

“Esta é uma descoberta verdadeiramente extraordinária e emocionante” salienta Greg Delory, investigador da missão LCROSS na Universidade da Califórnia, em Berkeley, acrescentando ainda que “O mais importante é o que iremos fazer a seguir para responder a perguntas como: De onde veio a água? Há quanto tempo lá está?”.

Especula-se que a água detectada possa provir de cometas ou reacções químicas envolvendo o vento solar.

(adaptado de *Chemical & Engineering News* - <http://pubs.acs.org/cen/news/87/i46/8746news9.html>, acedido em 13/11/2009)

Paulo Brito

OURO COVALENTE

Dados experimentais confirmaram previsões computacionais anteriores que demonstram que as ligações Au–C em $\text{Au}(\text{CN})_2^-$ têm um significativo carácter covalente, ao contrário do comportamento iónico dos complexos homólogos mais leves de cobre e prata.

A investigação liderada por Lai-Sheng Wang da Universidade de Brown em colaboração com Jun Li da Universidade Tsinghua, na China, proporciona uma nova visão das interacções de ligação envolvendo metais mais pe-

sados e pode conduzir a uma melhor compreensão das propriedades catalíticas do ouro (*J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 16368). Os investigadores usaram espectroscopia fotoelectrónica em fase gasosa e cálculos teóricos para definir a estrutura electrónica e determinar a densidade electrónica em $\text{M}(\text{CN})_2^-$ para $\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}$ ou Au .

Verificaram que, apesar das orbitais moleculares serem semelhantes, as estruturas electrónicas se revelavam significativamente diferentes, variando do comportamento marcadamente mais iónico do cobre até ao carácter

covalente de ligação múltipla do ouro. Os resultados indicam que a hibridação das orbitais *s* e *d* e um aumento na afinidade electrónica levam o ouro a formar ligações covalentes. Estas propriedades conduzem a uma alta estabilidade do complexo $\text{Au}(\text{CN})_2^-$, que tem sido usado desde a Antiguidade na extracção e processamento do ouro.

(adaptado de *Chemical & Engineering News* - <http://pubs.acs.org/cen/news/87/i46/8746news7.html>, acessado em 12/11/2009)

Paulo Brito

LUZ GUIA GOTAS DE ÓLEO ATRAVÉS DA ÁGUA

Investigadores da *École Normale Supérieure de Paris* desenvolveram um novo método para conduzir gotículas líquidas ao longo de uma superfície líquida, utilizando para o efeito o poder da luz: a alteração do comprimento de onda da radiação permite controlar a direcção de deslocamento das gotículas (*Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009) 9281). Damien Baigl e colaboradores designaram este processo por “efeito cromocapilar”, prevendo-se a sua aplicação em numerosos fins, nomeadamente, em materiais fotoactivos

“inteligentes” ou na manipulação de amostras líquidas perigosas. Apesar da fotomanipulação de gotículas líquidas ser, no momento, uma área de investigação activa, este estudo apresenta-se, segundo os seus autores, como o primeiro a demonstrar o movimento reversível de gotículas líquidas, controlado pelo comprimento de onda da luz incidente. O grupo de Baigl colocou uma gotícula de ácido oleico sobre a superfície de uma solução aquosa do composto fotossensível tensoactivo (brometo de trimetilamónio-azobenzeno), contida numa placa de Petri. Quando a gotícula é iluminada, é estabelecido um determinado gradiente de tensão superficial

na interface óleo-água. No entanto, quando o comprimento de onda da luz é alterado, o tensoactivo transita entre as configurações isoméricas *cis* e *trans*, induzindo uma alteração no gradiente de tensão superficial e forçando a gotícula a responder a essa alteração.

(adaptado de *Chemical & Engineering News* - <http://pubs.acs.org/cen/news/87/i46/8746news8.html>, acessado em 13/11/2009)

Paulo Brito

ANTI-CONGELANTE NATURAL NÃO PROTÉICO

Foi descoberta pela primeira vez uma molécula anti-congelante natural que não contém proteínas na sua composição, o que poderá permitir no futuro a sua aplicação na indústria alimentar ou na criopreservação de tecidos para o transplante de órgãos.

Muitos dos seres vivos que necessitam de sobreviver em habitats frios possuem moléculas que adsorvem na superfície de gelo, permitindo assim baixar o ponto de fusão dos seus fluidos corporais e proteger os tecidos de temperaturas muito baixas. Todos os anti-congelantes naturais encontrados

até esta descoberta continham proteínas na sua composição. Recentemente, uma equipa de investigadores de várias instituições, liderada pela Universidade de Notre Dame, isolou um polissacarídeo anti-congelante de um besouro adulto (*Upis ceramoides*), que vive numa região bem no interior do Alasca (*Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106** (2009) 20210). Estes besouros e as suas larvas sobrevivem aos duros invernos do Alasca, mas são os adultos que têm de suportar o frio mais intenso. Os besouros adultos congelam a -6°C , mas o polissacarídeo anti-congelante permite-lhes tolerar temperaturas muito baixas, que podem chegar aos -60°C . O polissacarídeo isolado permite baixar o ponto de

fusão da água em $3,7^\circ\text{C}$, valor semelhante aos anti-congelantes proteicos mais activos. Embora a equipa não tenha ainda determinado na totalidade a estrutura do agente, o seu trabalho espectroscópico e bioquímico sugere que deverá conter um componente lipídico e um núcleo dissacarídeo com unidades de manose e xilose.

A equipa supõe que anti-congelantes deste tipo possam também ser encontrados em outras espécies animais.

(adaptado de *Chemical & Engineering News* **87** (2009) 9)

Helder Gomes

COMPOSTOS INORGÂNICOS COMO FÁRMACOS

MÔNICA APARECIDA RODRIGUES, REINALDO RUGGIERO
E WENDELL GUERRA*

Este artigo aborda de forma sucinta a aplicação de compostos inorgânicos como fármacos, dando um enfoque especial para os compostos de platina, bismuto e prata.

Palavras-chave: Química inorgânica medicinal; complexos metálicos; agentes antitumorais

Inorganic compounds as drugs: This article discusses briefly the application of inorganic compounds as drugs, with a special focus on the compounds based on platinum, bismuth and silver.

Keywords: Medicinal inorganic chemistry; metal complexes; anticancer agents

INTRODUÇÃO

As inúmeras actividades biológicas exercidas por iões metálicos têm recentemente estimulado o desenvolvimento de fármacos à base de metais (*metal-based drugs*). Embora o uso de compostos inorgânicos para o tratamento de enfermidades seja muito antigo, até à descoberta da actividade antitumoral do complexo denominado cisplatina, $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$, por Rosenberg e colaboradores em 1965, não havia grande interesse em sintetizar ou entender as bases moleculares responsáveis pelo mecanismo de acção destes compostos. De facto, a descoberta de Rosenberg impulsionou a pesquisa e o desenvolvimento de fármacos à base de metais [1, 2]. A introdução da cisplatina nas práticas médicas em 1978 provocou uma corrida científica no sentido de obter novos compostos com melhor actividade antitumoral, menor toxicidade e maior espectro de acção, sobretudo no que diz respeito às células resistentes à cisplatina. Assim, desde 1965 até hoje, foram lançados no mercado seis novos complexos de platina dos quais podemos destacar a carboplatina que possui menor efeito nefrotóxico do que a cisplatina, podendo ser administrada em doses maiores. Além da cisplatina e da carboplatina, os outros complexos de platina disponíveis para tratar diversos tipos de cancro são a oxaloplatina, nedaplatina,

sunpla/SK-2053R e lobaplatina [2,3]. Em relação a outros fármacos à base de metais, há actualmente vários compostos inorgânicos que são utilizados na medicina moderna, dentre os quais podemos destacar os complexos de gadolínio(III), que são utilizados como agentes de contraste em ressonância magnética, os

de tecnécio-99, que são usados na obtenção de imagens cardiovasculares, e os de ouro, ferro e bismuto, que são utilizados no tratamento da artrite reumatóide, hipertensão e úlceras pépticas, respectivamente [2-6]. Na Figura 1 e na Tabela I listam-se vários compostos inorgânicos actualmente disponíveis como fármacos.

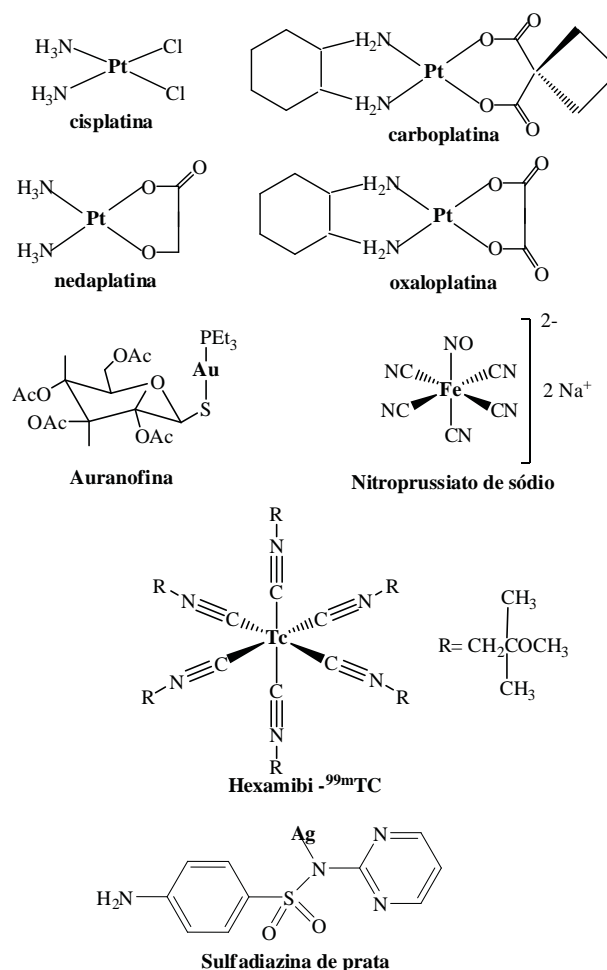


Figura 1 Estrutura de alguns complexos metálicos utilizados na clínica médica

Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Campus Santa Mônica, Bloco 1D, 38400-902, Uberlândia - MG - Brasil
* e-mail: wg@iqfufu.ufu.br

Tabela 1 Compostos inorgânicos utilizados no tratamento e diagnóstico de doenças

Composto	Uso clínico/função*	Comentário
Li_2CO_3	Tratamento de perturbação bipolar	
CaCO_3 e $\text{Mg}(\text{OH})_2$	Antiácidos	
$\text{La}_2^{III}(\text{CO}_3)_3$ Fosrenol™	Falência renal crónica	Age reduzindo a absorção de fosfato
BaSO_4	Agente de contraste	

Além dos complexos citados, que são amplamente utilizados como medicamentos, há uma variedade de compostos inorgânicos que estão a ser investigados em relação ao seu possível uso em clínica médica. Dentre os mais promissores como agentes antitumorais estão os complexos de ruténio, gálio, ouro, titânio e platina [7-11]. Outros complexos promissores são os de vanádio para tratamento da diabetes [10] e os de paládio(II) como agentes anti-infecciosos [12, 13].

A coordenação de metais a fármacos e moléculas que não são utilizadas como medicamento representa um potencial considerável para aumentar o arsenal de medicamentos disponíveis para o tratamento de enfermidades [14, 15]. Entretanto, o desenvolvimento de fármacos, sejam eles orgânicos ou inorgânicos, não é uma tarefa fácil. No caso específico de compostos inorgânicos, a bioacumulação do ião metálico pode causar efeitos colaterais graves e, portanto, devem ser investigados aspectos farmacológicos e fisiológicos *in vivo* utilizando modelos animais que comprovem a eficácia e segurança do composto antes da libertação do fármaco para testes clínicos em humanos [6]. É interessante comentar que recentemente o medicamento Fosrenol™ ($\text{Ln}_2(\text{CO}_3)_3$) foi autorizado pela FDA (*Food and Drug Administration-USA*) para uso clínico no tratamento de pacientes que sofrem de falência renal crónica. O fármaco, que age reduzindo a absorção de fosfato, é considerado uma droga simples, eficaz e segura [7].

Considerando a relevância do tema, este artigo relata alguns dos avanços recentes no desenvolvimento de

complexos de platina, bismuto e prata como agentes terapêuticos promissores.

DESENVOLVIMENTO DE COMPLEXOS DE PLATINA COMO AGENTES ANTITUMORAIS

A cisplatina, um complexo com geometria quadrangular plana, foi preparada pela primeira vez em 1844 por Michele Peyrone, mas somente em 1965 é que a sua propriedade antitumoral foi descoberta. Como referido anteriormente, a cisplatina apresenta alguns efeitos colaterais severos como nefrotoxicidade, pelo que a preparação e desenvolvimento de novos complexos de platina que sejam mais eficientes e mais seguros são um estímulo para investigadores da área. De facto, milhares de complexos têm sido sintetizados e testados, mas somente seis são actualmente utilizados em clínica médica [4].

Complexos antitumorais clássicos de platina possuem ligandos lábeis, sendo haletos e carboxilatos os mais comuns, e ligandos estáveis, como por exemplo, aminas, que acompanham o complexo até ao interior da célula onde o mesmo interage com o ADN. Neste sentido, a utilização de diferentes ligandos pode modificar a actividade biológica dos complexos [16]. Além de novos tipos de ligandos, outra estratégia utilizada é a modificação da carga do metal. Os complexos de platina (IV) estão bem estudados, pois são em geral mais solúveis em água quando comparados com os análogos de platina (II), além de possuírem outras características que despertam o interesse no seu estudo [16]. Além disso, os complexos de Pt(IV) possuem um número

de coordenação maior apresentando a possibilidade de serem mais lipofílicos através da inserção de ligandos adicionais que conferem esta característica. Além dos complexos de Pt(II) e Pt(IV) com geometria *cis*, os complexos do tipo *trans* também são alvo de investigação. Durante décadas, estes complexos foram marginalizados devido ao facto de o análogo *trans* da cisplatina ser inactivo *in vivo* e significativamente menos citotóxico *in vitro* quando comparado com a cisplatina. Porém, vários complexos com geometria *trans* foram obtidos nos últimos anos, os quais demonstraram resultados animadores em relação à actividade citotóxica, pois demonstraram ser activos em linhagens celulares resistentes à cisplatina. Contudo, por enquanto, nenhum destes compostos entrou em fase de testes clínicos [17]. Alguns autores têm especulado que a síntese racional de complexos do tipo *trans* pode ser uma solução para o problema da resistência intrínseca ou adquirida à cisplatina e, portanto, merecem continuar a ser investigados, até mesmo por que não se sabe ao certo o mecanismo de acção destes compostos [17].

Actualmente, há vários complexos de platina em fase de testes clínicos e outros que embora ainda não estejam em fase de testes clínicos são muito promissores. Um complexo de platina(II) análogo à cisplatina, que é alvo de particular atenção, é o complexo denominado ZDO473 ou AMD473 (complexo I, Figura 2), que apresenta na sua estrutura o ligando 2-metilpiridina e que se encontra na fase III de testes clínicos. Este complexo, em combinação com adriamicina, está a ser avaliado no tratamento de cancro do ovário onde outros fármacos antitumorais semelhantes à cisplatina e paclitaxel não tiveram efeito. Quanto à toxicidade, durante a fase II de testes clínicos não foram observados efeitos tóxicos como nefrotoxicidade, neurotoxicidade periférica ou ototoxicidade. Outros efeitos colaterais como náuseas, vómitos e gosto metálico na boca foram considerados brandos [18-22].

A ausência de efeitos colaterais graves é importante, pois permite que o fármaco possa ser administrado em doses maiores.

Vários complexos de platina(IV) mostraram ser promissores durante testes realizados *in vitro* e *in vivo*, mas apenas o complexo II, Figura 2, conhecido como JM-216 (satraplatina) se encontra na fase III de testes clínicos. A satraplatina pode vir a ser o primeiro composto de platina a ser administrado por via oral e, quando comparado com a cisplatina, apresenta a vantagem de ser menos tóxica [6, 9]. Curiosamente este composto teve os testes interrompidos durante a fase I de testes clínicos por apresentar diferentes modos de mecanismo de acção e uma baixa absorção celular [4]. Outro complexo de platina(IV) bastante promissor é o complexo III, Figura 2, que é activo em linhagens celulares resistentes à cisplatina e que pode futuramente ser utilizado em casos onde há uma resistência adquirida ou intrínseca à cisplatina [23].

A utilização de complexos metálicos como fármacos é limitada principalmente pela toxicidade, pela degradação do fármaco *in vivo* e pela pouca solubilidade em água. Neste aspecto, a utilização de sistemas capazes de transportar o fármaco até um alvo específico é uma estratégia que vem contribuindo para resolver estes problemas [24].

As ciclodextrinas (CDs) são uma classe de compostos macrocíclicos livres de toxicidade e de baixo custo, que formam complexos de inclusão com vários fármacos. Como resultado, obtêm-se complexos que são em geral mais solúveis em água, mais estáveis nos meios biológicos e menos tóxicos [24]. Um exemplo interessante, envolvendo a formação de um complexo de inclusão com ciclodextrinas, é a encapsulação do complexo *trans*-dicloro(dipiridina)platina(II).

O complexo resultante, Figura 2, complexo IV, tornou-se mais solúvel em água e sua actividade antitumoral melhorou significativamente. Os resultados obtidos mostraram que o complexo de inclusão do tipo 1:1 é 4,6 e 6,1 vezes mais activo *in vitro* do que a cisplatina nas linhagens celulares CT26 e B16F10, respectivamente [17]. Krause-Heur *et al* [25] obtiveram complexos de inclusão do tipo 1:1 e 1:2 com β -ciclodextrina substituída e

demonstraram que ocorre um decréscimo significativo na degradação dos complexos de platina pela L-glutamina reduzida. Além do aumento na estabilidade, os complexos formados permaneceram activos em linhagens celulares (LoVo) de cancro colo-rectal. Estes resultados reforçam a utilização de ciclodextrinas como sistemas transportadores de fármacos nas circunstâncias em que o composto apresenta pouca solubilidade em água ou quando é instável nos meios biológicos. Têm sido publicados inúmeros trabalhos na literatura demonstrando as vantagens obtidas nos processos de inclusão [26-28].

Uma outra classe de compostos bastante promissora, no sentido de se obterem novos complexos de platina activos em células resistentes à cisplatina, é aquela em que os complexos contêm duas ou mais unidades de platina ligadas por um ligando diaminado de cadeia carbónica de comprimento variável (grupo espaçador), sendo o grupo lábil composto por cloretos, sulfóxidos ou malonatos [29-31]. Uma característica interessante destes complexos multinucleares é a possibilidade de obtenção de compostos com diferentes grupos a ligarem os centros metálicos, grupos espaçado-

res, que vão alterar as propriedades físico-químicas do composto, influenciando o seu modo de acção.

Dentre os compostos obtidos até ao momento, um complexo trimetálico de platina conhecido como BBR3464, complexo V, Figura 2, é considerado bastante promissor, pois testes feitos *in vitro* demonstraram resultados interessantes, uma vez que o complexo exibiu maior actividade que a cisplatina em linhagens resistentes [32]. Este composto encontra-se na fase II de testes clínicos para tratamento de cancro do estômago e do ovário [33]. A interacção destes compostos contendo dois ou mais centros metálicos com o ADN é apontada como o maior factor para a citotoxicidade, sendo sugerido que ocorre a formação de diferentes aductos com o ADN, podendo ser esta a causa da elevada sensibilidade apresentada por eles em células resistentes à cisplatina [34]. Entretanto, a acumulação de fármaco pode ser um factor determinante para a sua citotoxicidade, e uma especulação é que a concentração intracelular destes compostos seja superior à de cisplatina em células resistentes, ou que a sua taxa de entrada na célula seja maior do que a de cisplatina.

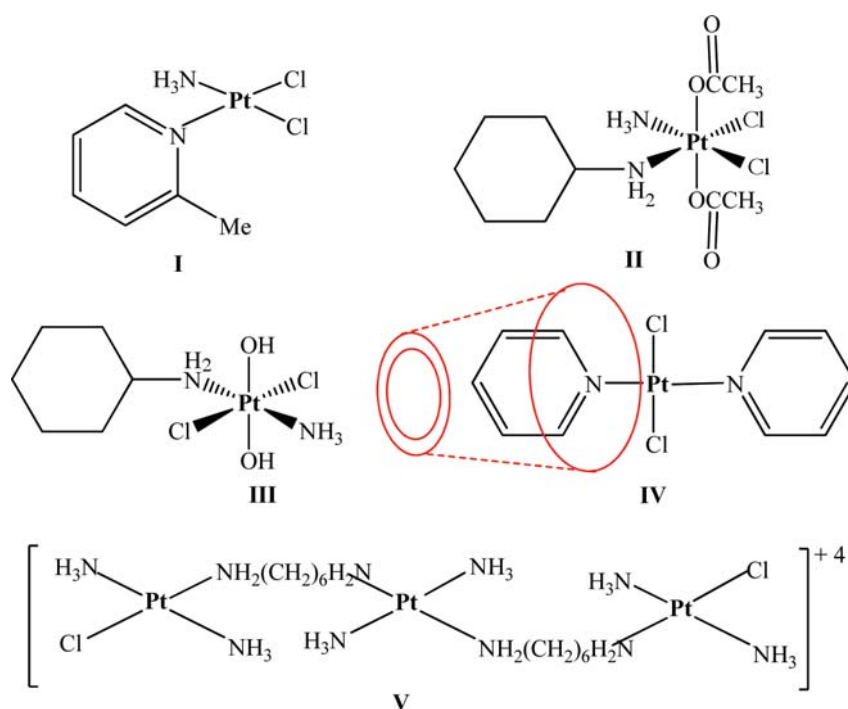


Figura 2 Estrutura de alguns complexos de platina promissores

USO E DESENVOLVIMENTO DE COMPLEXOS DE BISMUTO COMO AGENTES TERAPÊUTICOS

As úlceras pépticas induzidas pela bactéria Gram-negativa *Helicobacter pylori* estão entre as infecções mais comuns em seres humanos, afectando aproximadamente 80% da população em países subdesenvolvidos. Além disso, acredita-se que existe uma relação entre a infecção causada pela *H. pylori* e o cancro gástrico [35]. O tratamento de úlceras pépticas causadas pela *H. pylori* consiste na erradicação da bactéria. Neste aspecto, diversas formulações farmacêuticas contendo complexos de bismuto (De-nol®, Pepto-Bismol®, Pylorid®) são não só utilizadas no tratamento de úlceras pépticas, mas também nos casos de diarreia e dispepsia [36]. Além disso, compostos de bismuto são também utilizados noutras situações como no tratamento da sífilis e cancro [36, 37].

No que respeita ao desenvolvimento de fármacos à base de bismuto, refira-se que complexos de bismuto(III) contendo derivados de tiosemicarbazonas apresentam boa actividade antibacteriana contra as bactérias Gram-positivas *Staphylococcus aureus* e *Bacillus subtilis* [38]. A respeito da coordenação de metais em moléculas biologicamente activas, foram obtidos complexos de Bi(III) contendo antibióticos da família das fluorquinolonas (ciprofloxacina e norfloxacina). O complexo com ciprofloxacina tem potencial uso no tratamento de *H. pylori* [39]. Já o complexo de Bi(III) contendo a norfloxacina, é mais solúvel em água e mais activo quando comparado quer com a norfloxacina livre quer com a mistura física norfloxacina/citrato de bismuto.

Os resultados deste trabalho demonstram que este complexo é uma alternativa à norfloxacina, principalmente no tratamento de infecções provocadas por *Bacillus pumilis* (NTCC 8241) e *Escherichia coli* (ATCC 25922) [40]. É interessante comentar que, recentemente, um medicamento contendo citrato de bismuto coloidal, metronidazol e tetraciclina foi aprovado pela FDA para o tratamento e erradicação da *H. pylori* [37].

Refira-se que, em relação à actividade antitumoral de compostos de bismuto, estes foram estudados inclusive *in vivo* contra cancro do sangue (leucemia) em ratos e exibem óptima actividade antitumoral que pode atingir 100% de cura. Estudos *in vitro* realizados com diversos complexos de bismuto demonstraram que estes compostos possuem actividade superior à exibida pela cisplatina quando utilizados no tratamento de leucemia e cancro do ovário [41]. Recentemente, foi sugerida a administração de bismuto em associação com a cisplatina, uma vez que alguns compostos de bismuto diminuem a nefrotoxicidade causada pela cisplatina [41]. Luchi *et al* [42] sintetizaram um complexo organometálico de Bi(III) que apresenta forte actividade antibacteriana e antitumoral em linhagens celulares de leucemia e cancro humano. Um complexo de bismuto interessante e muito promissor é o que contém o ligando TPC, Figura 3. Além de ser solúvel em água, ele apresenta excelente actividade citotóxica contra a linhagem de cancro de pele B16-BL6. A inibição de 82% no crescimento celular deu-se em apenas 48 horas, para uma concentração de 0,25 μM . O IC_{50} (concentração inibitória para 50% de células) do complexo para a linhagem B16-BL6 é de apenas 41 nM, que é cerca de 100 vezes maior que o da cisplatina [43].

Investigadores do *National Cancer Institute* dos EUA avaliaram uma série de compostos inorgânicos com potencial actividade antitumoral. Nestes estudos, as relações entre estrutura e actividade são avaliadas pela capacidade do fármaco de inibir o crescimento de células tumorais. Com estes esforços, os investigadores têm sugerido possíveis mecanismos de acção para diversos compostos considerados promissores. No caso dos complexos de bismuto contendo ditiocarbamatos e tropolonas foi sugerido que a actividade antitumoral destes compostos pode estar relacionada com a inibição de enzimas [44]. Apesar de alguns avanços recentes, ainda persistem dúvidas sobre o mecanismo de acção destes compostos e novos estudos devem ser realizados. Em relação ao potencial uso de complexos de bismuto em clínica mé-

dica, os ligandos contendo oxigénio e enxofre como átomos doadores são bastante promissores e merecem ser objecto de investigação [38]. Além de complexos de Bi(III), compostos contendo isótopos de ^{212}Bi e ^{213}Bi têm sido utilizados em radioterapia para o tratamento de cancro [45].

Relativamente à segurança no emprego destes compostos, os complexos de bismuto são fármacos que possuem baixa toxicidade, tendo como efeitos colaterais mais comuns a disfunção neurológica e a nefrotoxicidade em consequência da sobredosagem. A nefrotoxicidade é diagnosticada pela detecção de bismuto no plasma, soro ou sangue. Os efeitos tóxicos provocados pelo bismuto são reversíveis ao longo de algumas semanas ou meses, quando a ingestão de bismuto é interrompida. Em ensaios com animais, a sobredosagem de bismuto causou uma diminuição nos níveis séricos de testosterona sugerindo que estes compostos podem causar disfunção reprodutiva [38].

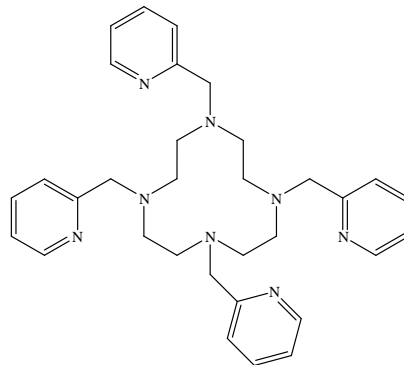


Figura 3 Estrutura do ligando TPC

O USO DE COMPLEXOS DE PRATA COMO AGENTES ANTIMICROBIANOS

Um bom exemplo de metal coordenado a fármaco é a sulfadiazina de prata, Figura 1, que é muito utilizada em pacientes queimados para evitar e tratar infecções. Este fármaco de uso tópico combina, num só composto, as propriedades antibacterianas do ião prata e da sulfadiazina que é um antibiótico de origem sintética. Como resultado, este composto possui amplo espectro de actividade contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, sendo muito eficiente contra *Pseudomonas aeruginosa* que é um dos principais organismos responsáveis por infec-

ções decorrentes de queimaduras. É interessante notar que sais de prata, como por exemplo o AgNO_3 , foram utilizados durante séculos como agentes antimicrobianos e que o uso destes compostos diminuiu muito quando os antibióticos foram introduzidos nas práticas médicas. Porém, eles mantiveram-se como um dos agentes mais populares para tratar infecções, especialmente em pacientes queimados. Em virtude do aumento de casos envolvendo resistência aos antibióticos, os compostos de prata, em especial o da sulfadiazina, vêm ganhando espaço [46].

No que se refere ao desenvolvimento de novos compostos, um complexo de prata(I) contendo o sulfametoxazol, que também é um antibiótico da mesma família da sulfadiazina (sulfonamidas) foi avaliado em relação a *Staphylococcus aureus*, *Escherichia Coli* e *Pseudomonas aeruginosa*. Os resultados mostraram que o complexo ($\text{IC}_{50} = 64 \mu\text{g mL}^{-1}$) é quatro vezes mais activo nas linhagens *S. aureus* e *E. Coli* quando comparado com o fármaco livre. Na linhagem *P. aeruginosa* o composto metálico é trinta e duas vezes mais activo que o antibiótico, exibindo um valor de IC_{50} igual a $16 \mu\text{g mL}^{-1}$ [47]. Um complexo de prata, também contendo um antibiótico, a norfloxacin, foi obtido e verificou-se que o mesmo pode ser utilizado para prevenir infecções em humanos durante o tratamento de queimaduras. A sua actividade antibacteriana é superior à do fármaco sulfadiazina de prata [48]. Raí *et al* [49] sintetizaram um complexo de prata (I) do tipo $[\text{Ag}_4(\text{dppm})_2(\text{L})_2(\text{NO}_3)_2]$ sendo $\text{dppm} = \text{bis}(\text{difenilfosfina})\text{metano}$ e $\text{HL}_2 = [(\text{E})\text{-}3\text{-}(4\text{-}(9\text{H}\text{-}\text{carbazol}\text{-}9\text{-il})\text{fenil})\text{ácido acrílico}]$ e a sua actividade antibacteriana foi avaliada em relação a duas bactérias Gram-positivas (*Bacillus subtilis* ATCC 6633 e *Staphylococcus aureus* ATCC 6538) e duas bactérias Gram-negativas (*Pseudomonas aeruginosa* ATCC 13525 e *Escherichia coli* ATCC 35218).

O complexo $[\text{Ag}_4(\text{dppm})_2(\text{L})_2(\text{NO}_3)_2]$ apresenta forte actividade antibacteriana contra a linhagem *B. subtilis* ATCC 6633 (MIC = $0,78 \mu\text{g} / \text{mL}$) sendo superior à actividade do antibiótico penicilina (MIC = $1,562 \mu\text{g} / \text{mL}$).

A respeito do uso da prata como agente antibacteriano e antifúngico, estudos promissores indicam que nanopartículas de prata (NPs) podem ser utilizadas contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, incluindo estirpes multi-resistentes. O efeito bactericida das NPs, bem como de nanocompósitos de prata, tem sido intensamente estudado [50].

CONCLUSÕES

O sucesso dos compostos inorgânicos nas práticas médicas tem estimulado novas pesquisas no sentido de desenvolver novos agentes terapêuticos à base de metais. Neste aspecto, a síntese e a avaliação biológica têm conduzido à descoberta de importantes fármacos. Vários complexos de platina, como agentes antitumorais, têm sido obtidos e, considerando as estruturas destes compostos, parece não haver um pré-requisito estrutural. Novos compostos de bismuto vêm sendo obtidos e devido às excelentes actividades citotóxicas demonstradas *in vitro* e a baixa toxicidade exibida por compostos deste elemento, há a possibilidade dos mesmos serem utilizados como agentes antitumorais, sózinhos ou em associação com outros fármacos. Quanto ao uso de compostos de prata, reforçamos a necessidade de se concentrarem esforços na sua preparação e desenvolvimento, uma vez que podem ser desenvolvidos novos compostos de prata como agentes terapêuticos de uso tópico.

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Uberlândia.

REFERÊNCIAS

- [1] C. Orvig, M. J. Abrams, *Chem. Rev.* **99** (1999) 2201.
- [2] A. P. S. Fontes, E. T. César, H. Beraldo, *Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola: A Química Inorgânica na Terapia do Câncer* **6** (2005) 13.
- [3] W. Guerra, A. P. S. Fontes, M. V. de Almeida, H. Silva, *Quim. Nova* **28** (2005) 809.
- [4] D. J. Newman, G. M. Cragg, *J. Nat. Prod.* **70** (2007) 461.
- [5] S. M. Cohen, *Curr. Op. Chem. Biol.* **11** (2007) 115.
- [6] C. X. Zhang, S. J. Lippard, *Curr. Op.*

Chem. Biol. **7** (2003) 481.

- [7] S. P. Fricker, *Dalton Trans.* (2007) 4903.
- [8] E. Reisner, V. B. Arion, B. K. Keppler, A. J. L. Pombeiro, *Inorg. Chim. Acta* **361** (2008) 1569.
- [9] J. Kaspáková, O. Nováková, O. Vrána, F. Intini, G. Natile, V. Brabec, *Mol. Pharmaco.* **70** (2006) 1708.
- [10] K. H. Thompson, B. Lichter, C. LeBel, M. C. Scaife, J. H. McNeill, C. Orvig, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 554.
- [11] I. Ott, *Coord. Chem. Rev.* **253** (2009) 1670.
- [12] A. Garoufis, S. K. Hadjikakou, N. Hadjiliadis, *Coord. Chem. Rev.* **253** (2009) 1384.
- [13] W. Guerra, E. A. Azevedo, A. R. S. Monteiro, M. Bucciarelli-Rodriguez, E. Chartone-Souza, A. M. A. Nascimento, A. P. S. Fontes, L. L. Moyec, E. C. Pereira-Maia, *J. Inorg. Biochem.* **99** (2005) 2348.
- [14] L., Ronconi, L., P. J. Sadler, *Coord. Chem. Rev.* **251** (2007) 1633.
- [15] P. C. A. Buijninx, P. J. Sadler, *Curr. Op. Chem. Biol.* **12** (2008) 197.
- [16] W. Guerra, H. Silva, M. V. de Almeida, A. P. S. Fontes, *Quim. Nova* **30** (2007) 56.
- [17] U. Kalinowska-Lis, J. Ochocki, K. Matlawska-Wasowska, *Coord. Chem. Rev.* **252** (2008) 1328.
- [18] F. I. Raynaud, F. E. Boxall, P.M. Goddard, M. Valenti, M. Jones, B.A. Murrer, M. Abrams, L. R. Kelland, *Clin. Cancer Res.* **3** (1997) 2063.
- [19] J. Holford, F. Raynaud, B. A. Murrer, K. Grimaldi, J. A. Hartley, M. Abrams, L. R. Kelland, *Anticancer Drug Des.* **13** (1998) 1.
- [20] Y. Chen, Z. Guo, S. Parsons, P. J. Sadler, *Chem. Eur. J.* **4** (1998) 672.
- [21] Y. Chen, J. A. Parkinson, Z. Guo, T. Brown, P. J. Sadler, *Angew Chem. Int. Ed.* **38** (1999) 2060.
- [22] K. A. Gelmon, T. A. Vandenberg, L. Panasci, B. Norris, M. Crump, L. Douglas, W. Walsh, S. J. Matthews, L. K. Seymour, *Annals of Oncology* **14** (2003) 543.
- [23] Y. E. Kwon, K. J. Whang, Y. J. Park, K. H. Kim, *Bioorg. Med. Chem.* **11** (2003) 1669.
- [24] G. Horvath, T. Premkumar, A. Boztas, E. Lee, S. Jon, K. E. Geckeler, *Mol. Pharm.* **5** (2008) 358.
- [25] A. M. Krause-Heuer, N. J. Wheate, M. J. Tilby, D. G. Pearson, C. J. Ottley, J. R. Aldrich-Wright, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 6880.

- [26] N. I. Shtemenko, E. D. Zabitskaya, O. V. Berzenina, D. E. Yegorova, A. V. Shtemenko *Chem. Biodiversity* **5** (2008) 1660.
- [27] D. Moreno, C. T. de Ilarduya, E. Bandre's, M. Buñuales, M. Azcona, J. García-Foncillas, M. J. Garrido, *Eur. J. Pharm. Biopharm.* **68** (2008) 503.
- [28] I. H. L. Hamelers, A. I. P. M. De Kroon, *J. Liposome Res.* **17** (2007) 183.
- [29] A. P. S. Fontes, Y. Zou, N. Farrel, *J. Inorg. Biochem.* **55** (1994) 79.
- [30] J. D. Roberts, B. Van Houten, Y. Qu, N. Farrel, *Nucl. Ac. Res.* **17** (1989) 9719.
- [31] J. D. Hoeschele, A. J. Kraker, Y. Qu, B. Van Houten, N. Farrel, *Molecular Basis of Specificity in Nucleic Acid-Drug Interactions*, Pullman, B.; Jortner, J.; Eds.; Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1990.
- [32] N. P. Farrel, Y. Qu, K. Kasparkova, V. Brabec, M. Valsecchi, E. Menta, R. di Domenico, G. da Re, A. Lotto, S. Spinelli, *Proc. Am. Assoc. Cancer Res.* **38** (1997) 2077.
- [33] A. L. Harris, J. J. Ryan, N. Farrell, *Mol. Pharmacol.* **69** (2006) 666.
- [34] N. Farrel, Y. Qu, M. P. Hacker, *J. Med. Chem.* **33** (1990) 2179.
- [35] M. S. P. Ladeira, D. M. F. Salvadori, M. A. M. Rodrigues, *J. Bras. Patol. Med. Lab.* **39** (2003) 335.
- [36] G. G. Briand, N. Burford, *Chem. Rev.* **99** (1999) 2601.
- [37] K. Nomiya, K. Sekino, M. Ishikawa, A. Honfa, M. Yokoyama, N. C. Kasuga, S. Nakano, K. Onodera, *J. Inorg. Biochem.* **98** (2004) 601.
- [38] S. Ahmad, A. A. Isab, S. Ali, A. R. Al-Arfaj, *Polyhedron* **25** (2006) 1633.
- [39] I. Turel, L. Golie, P. Bukovec, M. Gubina, *J. Inorg. Biochem.* **71** (1998) 53.
- [40] A. R. Shaikh, R. Giridhar, M. R. Yadav, *Int. J. Pharm.* **332** (2007) 24.
- [41] E. R. T. Tiekink, *Crit. Rev. Oncol. Hematol.* **42** (2002) 225.
- [42] K. Iuchi, Y. Hatano, T. Yagura, *Biochem. Pharmacol.* **76** (2008) 974.
- [43] X. Y. Wang, X. M. Zhang, J. Lin, J. W. Chen, Q. Xu, Z. J. Guo, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* (2003) 2379.
- [44] R. Huang, A. Wallqvist, D. G. Covell, *Biochem. Pharmacol.* **69** (2005) 1009.
- [45] J. G. Jurcic, *Crit. Rev. Oncol. Hematol.* **38** (2001) 37.
- [46] I. Chopra, *J. Antimicrob. Chemother.* **59** (2007) 587.
- [47] L. L. Marques, G. M. Oliveira, E. S. Lang, M. M. A. Campos, L. R. S. Gris, *Inorg. Chem. Commun.* **10** (2007) 1083.
- [48] M. S. Refat, *Spectrochim Acta Part A* **68** (2007) 1393.
- [49] M. Raí, A. Yadav, A. Gade, *Biotechnology Advances* **27** (2009) 76.
- [50] B. Ruan, Y. Tian, H. Zhou, J. Wu, Z. Liu, C. Zhu, J. Yang, H. Zhu, *J. Org. Chem.* **694** (2009) 2883.

ACTUALIDADE CIENTÍFICA

ZEÓLITOS COM POROS EQUILBRADOS

De acordo com investigadores do Instituto de Investigação Química da Catalunha, o tratamento de zeólitos com uma solução alcalina e catiões orgânicos relativamente grandes, promove a formação de uma estrutura cristalina porosa caracterizada por uma distribuição de tamanhos de poros idealmente adequados para aplicações catalíticas (*Adv. Funct. Mater.* **19** (2009) 1).

Os zeólitos são aluminossilicatos cristalinos e porosos, largamente usados como catalisadores na refinação do petróleo. Durante anos, os investigadores procuraram formas de preparar zeólitos com poros largos (mesoporos) para melhor acomodar moléculas grandes e permitir o fluxo de reagentes e de produtos para o interior e o exterior dos cristais.

Nesse sentido, foram desenvolvidos vários métodos, no entanto, muitos formam poros largos por eliminação de poros mais pequenos (microporos),

onde frequentemente se localizam os centros activos catalíticos do material, afectando por isso a sua performance catalítica.

Recentemente, uma equipa de investigadores liderada por Javier Pérez-Ramírez, anunciou que o tratamento do zeólito ZSM-5 com hidróxido de sódio na presença de iões tetrapropil- ou tetrabutílamónio (TPA⁺ e TBA⁺, respectivamente) aumenta o tamanho dos microporos maiores sem sacrificar os microporos mais pequenos.

A equipa explica que os iões hidróxido lixiviam a sílica do interior dos microporos, aumentando por isso o seu tamanho. Mas o crescimento dos poros, que até esta descoberta era difícil de controlar, é moderado pelos catiões TPA⁺ e TBA⁺, que adsorvem à entrada dos poros, impedindo a lixiviação do hidróxido.

Para quantificar os benefícios catalíticos do novo método, o grupo da Catalunha comparou zeólitos preparados de várias formas por um parâmetro que desenvolveram, o factor hierár-

quico (HF), que representa o produto entre o volume de microporos e a área superficial mesoporosa.

Em testes reaccionais efectuados, a equipa concluiu que os catalisadores mais produtivos eram os zeólitos com os valores de HF mais elevados. (adaptado de *Chemical & Engineering News* - <http://pubs.acs.org/cen/news/87/i46/8746news8.html>, acedido em 19/11/2009)

Helder Gomes

ELECTRONEGATIVIDADE: UMA CHAVE PARA A RESOLUÇÃO DAS DIFICULDADES DE APRENDIZAGEM EM QUÍMICA *

RUTE AMADEU¹ E JOÃO PAULO LEAL^{1,2}

A electronegatividade é um dos conceitos mais profícuos dentro da Química. Nesta contribuição começa-se por apresentar uma breve evolução histórica do conceito de electronegatividade. De seguida, sugere-se onde poderia ser introduzida nos actuais currícula e como poderia ser usada como fio condutor para o ensino/aprendizagem da Química.

Desde o seu aparecimento, a electronegatividade deu origem a uma área de investigação que continua em grande actividade, não sendo por isso um conceito datado ou ultrapassado. É também um conceito transversal a várias áreas da Química e portanto poderia ser usado como fio condutor para o ensino/aprendizagem da Química ao longo do 3º ciclo do Ensino Básico e do Ensino Secundário. Nesta breve contribuição pretendemos apenas mostrar a exequibilidade desta estratégia. Começaremos por apresentar uma breve evolução histórica do conceito de electronegatividade, mostrando que pode ser abordada de modo bastante conciso. No ensino básico e secundário apenas é apresentada, e de modo demasiado básico, a escala de Pauling. De seguida, sugeriremos onde poderia o conceito ser introduzido nos actuais currícula e ainda como pedagogicamente poderia ser abordado.

EVOLUÇÃO HISTÓRICA DO CONCEITO DE ELECTRONEGATIVIDADE

O conceito de electronegatividade foi introduzido por J.J. Berzelius, em 1811, que o definiu como sendo a capacidade que um átomo tem para atrair para si os electrões [1]. Linus Pauling aprofundou os estudos de Berzelius

e, no ano de 1931, propôs a primeira escala prática de electronegatividade que foi obtida por cálculo matemático [2]. Pauling começou por estabelecer o valor quatro como sendo o valor de electronegatividade para o átomo de flúor. A partir desse valor, calculou os valores para os restantes elementos da Tabela Periódica, através de uma equação matemática que relacionava a média aritmética da energia de ligação dos átomos envolvidos na ligação química com os respectivos valores de electronegatividade (equação 1);

$$|\chi_A - \chi_B| = 0.208 \sqrt{E_{A-B} - \frac{1}{2}(E_{A-A} + E_{B-B})} \quad (1)$$

onde $|\chi_A - \chi_B|$ é a diferença de electronegatividade entre χ_A e χ_B ; E_{A-B} é a energia de ligação na espécie A-B; E_{A-A} é a energia de ligação na espécie homonuclear A-A e E_{B-B} é a energia de ligação da espécie homonuclear B-B, todas estas expressas em kcal/mol.

Apesar de a escala original de electronegatividade proposta por Pauling se basear na média aritmética dos valores das energias de ligação dos átomos, Pauling verificou que era mais rigoroso utilizar uma média geométrica dos valores dessas mesmas energias ao invés de uma média aritmética, o que o obrigou a fazer alguns ajustes na sua primeira escala de electronegatividade.

A equação matemática que permite calcular os valores de electronegatividade dos elementos, a partir da média geométrica dos valores das energias de ligação, passa então a ser a equa-

ção 2 em que as grandezas têm o mesmo significado que anteriormente.

$$|\chi_A - \chi_B| = 0.183 \sqrt{E_{A-B} - (E_{A-A} \times E_{B-B})^{\frac{1}{2}}} \quad (2)$$

Os valores de electronegatividade tornaram-se extremamente úteis na previsão do carácter químico das ligações, podendo ser usados para prever de modo aproximado o grau de ionicidade de uma ligação química (equação 3), onde χ_A é a electronegatividade do átomo A e χ_B a electronegatividade do átomo B [3].

$$\% \text{Carácter Iónico} = 1 - e^{-\frac{1}{4}(\chi_A - \chi_B)^2} \quad (3)$$

Numa tentativa de aperfeiçoar o conceito de electronegatividade introduzido por Linus Pauling no ano de 1932, vários cientistas dedicaram-se à criação de escalas de electronegatividade, sendo algumas delas concordantes com a de Pauling. Outras, por seu lado, divergiam bastante quer na ideia subjacente quer nos valores de electronegatividade obtidos.

Em 1934, Robert S. Mulliken sugeriu que a electronegatividade dos elementos deveria ser calculada através da média aritmética do valor da primeira energia de ionização e da afinidade electrónica [4] (equação 4), onde χ^M seria a electronegatividade, ΔE a afinidade electrónica e ΔE_y a energia de ionização (actualmente e, de acordo com a nomenclatura IUPAC, a energia de ionização representa-se por I).

$$\chi^M = \frac{\Delta E + \Delta E_y}{2} \quad (4)$$

* Baseado numa tese de Mestrado apresentada na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.

¹ Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1149-016 Lisboa

² Unidade de Ciências Químicas e Radiofarmacêuticas, Instituto Tecnológico e Nuclear, 2686-953 Sacavém

Esta teoria divergia em alguns aspectos da proposta por Linus Pauling, uma vez que, ao contrário da escala de Pauling que se baseia em propriedades dos átomos em interação (energias de ligação), a escala de Mulliken baseia-se em propriedades intrínsecas de cada átomo (energia de ionização e afinidade electrónica). Na escala de Mulliken, o néon é o elemento mais electronegativo da Tabela Periódica, ao passo que Linus Pauling, não considerava os gases raros, e apontava o flúor como o elemento com maior electronegatividade. No entanto e, apesar de os valores numéricos serem diferentes, é possível estabelecer uma relação entre as duas escalas.

Em 1946, Gordy introduziu uma nova escala de electronegatividade que se baseava na força de atracção electrostática entre o núcleo de um átomo e os electrões de valência [5]. A electronegatividade seria dada pela equação 5, onde r é a distância entre o electrão e o núcleo, e a carga do electrão e Z_{eff} a carga nuclear efectiva¹.

$$\chi = \frac{e \times Z_{\text{eff}}}{r} \quad (5)$$

Outros trabalhos relevantes na área da electronegatividade, foram os de Walsh que concluiu que a electronegatividade do átomo de carbono dependia do seu estado de hibridação [6] e, os de Sanderson, que sugeriu que a electronegatividade de um elemento dependia do estado de oxidação do átomo e, conseqüentemente, da sua estabilidade radial [7]. Sanderson definiu uma relação matemática para calcular os diversos valores de electronegatividade (equação 6), onde χ é o valor de electronegatividade na escala de Pauling e SR a estabilidade radial [8].

$$\chi^{1/2} = 0,21SR + 0,77 \quad (6)$$

Em 1958 Allred e Rochow definiram a electronegatividade em função da carga nuclear efectiva e do raio covalente dos átomos, tal como Gordy tinha sugerido anteriormente, tendo, no entanto, feito algumas alterações à expressão matemática utilizada por Gordy [9]. A força de atracção electrostática foi então definida pela equação 7, onde r é a distância entre o electrão

e o núcleo, e a carga do electrão e Z_{eff} a carga nuclear efectiva.

$$F = \frac{e^2 \times Z_{\text{eff}}}{r^2} \quad (7)$$

Esta nova definição representa uma electronegatividade absoluta, porque não foi necessário fixar um valor para a electronegatividade de um elemento como referência; diferindo assim dos valores de Pauling que eram valores relativos a um valor inicialmente definido. No entanto, as duas escalas podem ser relacionadas através da equação 8, tendo as grandezas os significados anteriormente referidos (sendo χ a electronegatividade de Pauling).

$$\chi = 0,359 \times \frac{Z_{\text{eff}}}{r^2} + 0,744 \quad (8)$$

Allred e Rochow mencionaram ainda que, atendendo a que a capacidade de um átomo, numa molécula, de atrair electrões depende da combinação das orbitais utilizadas na ligação e, como a maioria dos elementos possui mais que um tipo de hibridação, torna-se mais rigoroso falar em termos de electronegatividade orbital do que em electronegatividade de um elemento.

Como exemplo das várias escalas já referidas, apresenta-se na Tabela 1 os valores de electronegatividade dos vários elementos segundo Pauling (a preto), Mulliken (a azul), Sanderson (a verde) e Allred-Rochow (a vermelho). Através da análise desta tabela, é possível verificar que a escala de electronegatividade que mais se aproxima da escala proposta por Pauling é a escala de Sanderson e a que apresenta valores mais díspares é a escala de Mulliken. É importante referir que, na Tabela 1, apenas se destacam os valores de Pauling, Mulliken, Sanderson e Allred-Rochow por estes serem considerados os pioneiros no estudo deste conceito.

Após o estudo de Allred-Rochow, Gordy definiu electronegatividade para um átomo neutro, numa molécula estável, como sendo o potencial em função da distância do raio covalente e da carga efectiva do núcleo. Assim, segundo Gordy, o potencial da ligação covalente é considerado como sendo uma medida absoluta de electronegatividade

de sendo calculado pela equação 9, onde r é a distância entre o electrão e o núcleo, e a carga do electrão e n o número de electrões de valência [9].

$$\chi_1 = \frac{0,5 \times e \times (n+1)}{r} \quad (9)$$

Frequentemente esta fórmula é apresentada com as constantes alteradas (equação 10) para que os seus valores sejam comparáveis com os obtidos pela escala de Pauling.

$$\chi_2 = 0,31 \times \frac{(n+1)}{r} + 0,50 \quad (10)$$

Pritchard e Skinner reviram a relação estabelecida por Gordy e utilizaram o método de Plater para determinar os valores da carga nuclear efectiva. Contudo, tornou-se necessário introduzir diferentes constantes na equação 10, consoante o período da tabela periódica em que se encontram os elementos.

Em 1962, foi proposta uma nova definição de electronegatividade por Hinze, Whitehead e Jaffé, que se baseava nos trabalhos de Iczkowski e Margrave [10]. Segundo Jaffé e os seus colaboradores, a electronegatividade de um átomo dependia da natureza da orbital envolvida na ligação química bem como da ocupação dessa orbital. Esta definição assemelha-se bastante à proposta por Mulliken e pode ser traduzida através da equação 11, onde $E(n)$ representa a energia do átomo para um dado estado de valência e n representa a ocupação dessa mesma orbital [10].

$$\chi = \frac{\partial E(n)}{\partial n} \quad (11)$$

Por volta de 1965, James E. Huheey dedicou-se ao estudo da electronegatividade de grupos, tendo utilizado um método análogo ao de Jaffé. A definição de electronegatividade aparentemente mais simples foi a proposta por L. C. Allen, no ano de 1989. Segundo Allen, a electronegatividade estava relacionada com a energia média dos electrões de valência num átomo livre (equação 12), onde χ_{spec} é o valor de electronegatividade espectroscópica, m o número de electrões na orbital p , n o número de electrões na orbital s , \mathcal{E}_s a energia de ionização da orbital s e \mathcal{E}_p a energia de ionização

Tabela 1 Comparação entre os valores de electronegatividade de Pauling (a preto), Mulliken (a azul), Sanderson (a verde) e Allred-Rochow (a vermelho)

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Período																		
1	H 2,1 3,06 2,31 2,20																	He
2	Li 1,0 1,28 0,86 0,97	Be 1,5 1,99 1,61 1,47											B 2,0 1,83 1,88 2,01	C 2,5 2,67 2,47 2,50	N 3,0 3,08 2,93 3,07	O 3,5 3,21 3,46 3,50	F 4,0 4,42 3,92 4,10	Ne 4,60
3	Na 0,9 1,21 0,85 1,01	Mg 1,2 1,63 1,42 1,23											Al 1,5 1,37 1,54 1,47	Si 1,8 2,03 1,74 1,74	P 2,1 2,39 2,16 2,06	S 2,5 2,65 2,66 2,44	Cl 3,0 3,54 3,28 2,83	Ar 3,36 3,92
4	K 0,8 1,03 0,74 0,91	Ca 1,0 1,30 1,06 1,04	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,8	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6 1,34 2,10 1,82	Ge 1,8 1,95 2,31 2,02	As 2,0 3,26 2,53 2,20	Se 2,4 2,51 2,76 2,48	Br 3,0 3,24 2,96 2,74	Kr 2,98 3,17
5	Rb 0,8 0,99 0,70 0,89	Sr 1,0 1,21 0,96 0,99	Y 1,2	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7 1,30 1,88 1,49	Sn 1,8 1,83 2,02 1,72	Sb 1,9 2,06 2,19 1,82	Te 2,1 2,34 2,34 2,01	I 2,5 2,88 2,50 2,21	Xe 2,59 2,63
6	Cs 0,7 0,69 0,86	Ba 0,9 0,93 0,97	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9 1,92 1,44	Tl 1,8 1,96 1,44	Pb 1,9 2,01 1,55	Bi 1,9 2,06 1,67	Po 2,0	At 2,2	Rn
7	Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1
0,92														
1,08														
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	Lo	Lr
1,1	1,3	1,5	1,7	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3

da orbital p [11].

$$\chi_{spec} = \frac{m\varepsilon_p + n\varepsilon_s}{m + n} \quad (12)$$

Como os valores de electronegatividade de Allen podem ser determinados directamente por métodos espectroscópicos, estes valores são muitas vezes designados por valores de electronegatividade espectroscópica.

O método de Allen permite determinar a electronegatividade de inúmeros elementos, inclusivamente daqueles que não poderiam ser determinados por nenhum outro método e dos quais

se pode destacar o frâncio, cujo valor de electronegatividade, nesta escala, é de 0,67. Contudo, este método também apresenta algumas limitações uma vez que não permite calcular a electronegatividade dos elementos dos blocos *d* e *f*. Actualmente, a electronegatividade dos átomos continua a ser um tema bastante estudado pela comunidade científica, o que é facilmente comprovado pelo elevado número de citações dos artigos relativos a este tema; pelo que, para além das escalas aqui referidas, muitas outras foram já definidas ou refinamentos foram feitos [12] e prevê-se que muitas outras possam vir a surgir.

LINHAS GERAIS DO PROGRAMA DE ENSINO

Pretende-se aqui dar uma noção, ainda que muito resumida, de como os actuais programas abordam a Química (ou os vários temas dentro da Química) no 3º ciclo do Ensino Básico e no Ensino Secundário, de modo a mais facilmente enquadrar o restante do texto.

No 7º ano de escolaridade, os alunos iniciam o seu estudo no mundo da Química começando por estudar a constituição do mundo material [13]. No 8º ano de escolaridade o programa de Físico-Química, e o da Física

em particular, dedica-se quase exclusivamente ao estudo de óptica e acústica. No que tange à unidade de Química, que geralmente é leccionada apenas no terceiro período, é feita apenas uma mera referência aos tipos de reacções químicas, à velocidade das reacções e à representação das reacções químicas [13].

No 9º ano de escolaridade, na unidade de Química é efectuada uma abordagem ao conceito de estrutura atómica, tabela periódica e propriedades das substâncias, finalizando com o conceito de ligação química [13].

No 10º ano de escolaridade do programa de Física e Química A, na unidade 1, "Das estrelas ao átomo", inicia-se o estudo da tabela periódica do qual faz parte a descrição da estrutura da tabela periódica; posição dos elementos na tabela periódica e respectivas configurações electrónicas; variação do raio atómico e da energia de ionização; propriedades dos elementos e das substâncias elementares. É, ainda, feita uma abordagem aos modelos de ligação química e da geometria das moléculas que existem na troposfera [14].

No 11º ano de escolaridade do programa de Física e Química A, é feita uma análise muito aprofundada sobre a indústria do amoníaco, o que implica um estudo minucioso acerca desta molécula [15].

No 12º ano de escolaridade do Curso de Ciências e Tecnologia, o programa consiste basicamente no estudo de: metais e ligas metálicas, reacções dos metais, combustíveis fósseis e a crise de energia, ligação química e estrutura dos hidrocarbonetos e outros compostos orgânicos e plásticos, vidros e novos materiais [16].

Através de uma breve análise dos programas é possível verificar que o conceito de electronegatividade poderia ser introduzido logo no 9º ano de escolaridade, aquando do estudo das ligações químicas e ser usado como fio condutor para os posteriores temas de Química. No entanto, o conceito de electronegatividade só é introduzido, e de modo apenas marginal, no 12º ano de escolaridade, ou seja, decor-

ridos cinco anos desde que os alunos iniciam o seu estudo no vasto mundo da Química.

Acresce ainda que os alunos que não optem no final do 3º ciclo por ter a disciplina de Física e Química A, ou optem por seguir um outro curso que não o de Ciências e Tecnologia, nunca abordarão o conceito de electronegatividade durante o seu percurso escolar.

A ELECTRONEGATIVIDADE NO ENSINO BÁSICO E SECUNDÁRIO

Na área da educação e, em particular, ao nível do ensino básico e secundário, continua a utilizar-se somente a definição de electronegatividade de Linus Pauling, independentemente de terem sido inúmeros os estudos inerentes a este conceito. É muito pouco frequente encontrar num manual escolar outra definição de electronegatividade que não a de Pauling. Paralelamente a esta visão algo limitada, também é possível verificar que existe um certo desfasamento entre a altura em que é abordado o conceito de electronegatividade e a altura em que seria desejável e, até mais vantajoso, a sua inserção.

É possível verificar, através da Figura 1 (ver página seguinte), que o conceito podia, e na nossa opinião devia, ser introduzido com facilidade no 9º ano de escolaridade. Podia ainda ser abordado de modo mais abrangente e ser posteriormente usado na explicação dos vários tipos de ligação química que se verificam na matéria.

ESTRATÉGIAS QUE PODEM AUXILIAR O PROCESSO DE ENSINO E APRENDIZAGEM DO CONCEITO DE ELECTRONEGATIVIDADE

Torna-se facilmente perceptível que a estratégia de abordagem que os programas do Ministério da Educação apresentam podem dificultar a aquisição de conhecimentos por parte dos alunos e, conseqüentemente, contribuir para o insucesso escolar. Assim, cabe aos professores tentar colmatar estas dificuldades através de abordagens mais criativas, que foquem uma maior compreensão dos conceitos envolvidos e potenciando

a sua utilização em maior número de situações na escola e na vida diária. Sugere-se que uma das vias a seguir seja a utilização das Tecnologias de Informação e Comunicação, de forma a promover o interesse dos alunos e despertar a curiosidade pelo conhecimento científico, nomeadamente como auxiliares que permitam uma melhor visualização do que se passa a nível molecular. Nesse sentido, apresentam-se algumas sugestões que os professores poderão aplicar nas suas aulas.

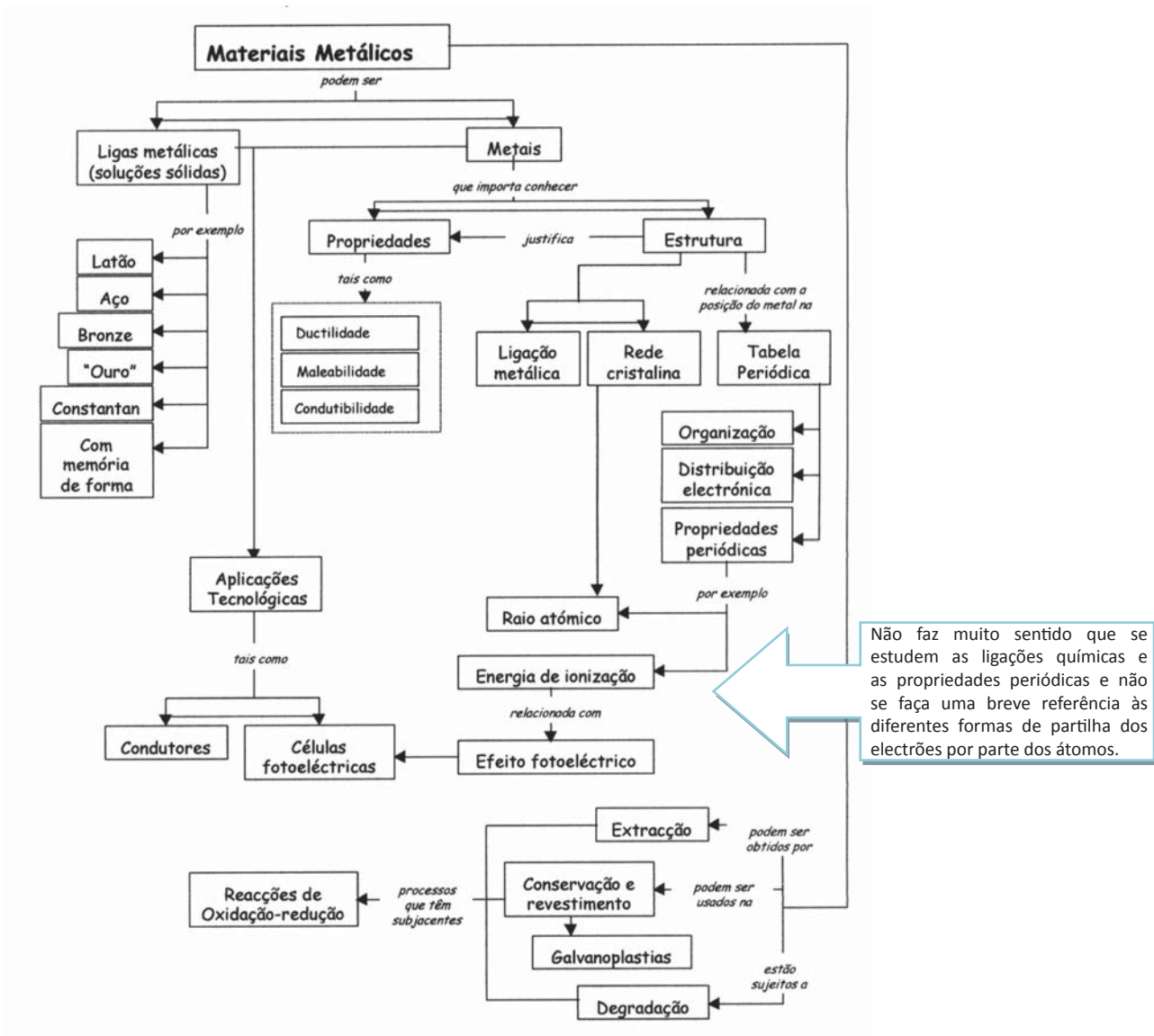
Muitos alunos têm alguma dificuldade de abstracção no que se refere a conceitos em química pelo que a representação das moléculas de modo mais gráfico pode ser um auxiliar.

Os exemplos sugeridos referem-se a algumas das moléculas mais comuns do programa de Física e Química A, e permitem a visualização das suas nuvens electrónicas, do respectivo comprimento de ligação e das cargas dos iões, entre outros. Estes exemplos, que não esgotam as possibilidades, pretendem ser utilizados com os alunos de forma a estimular a sua curiosidade para o estudo da Química e facilitar o seu processo de aprendizagem.

No primeiro exemplo (Figura 2 - ver página seguinte) mostra-se uma representação gráfica que permite que os alunos visualizem a molécula de HCl, nomeadamente, o tamanho relativo dos átomos e o comprimento de ligação.

A distância de equilíbrio e a carga de cada um dos átomos na molécula podem ser apresentados referindo que foram obtidos por um método computacional adequado.

No caso particular da molécula de HCl, os alunos podem inclusivamente determinar o valor da diferença de electronegatividade entre os átomos de hidrogénio e de cloro, usando para tal efeito os valores registados na escala de electronegatividade de Pauling (a escala de Linus Pauling é a escala adoptada por todos os autores dos manuais escolares), ou qualquer uma das outras escalas, apresentadas neste estudo.



Não faz muito sentido que se estudem as ligações químicas e as propriedades periódicas e não se faça uma breve referência às diferentes formas de partilha dos electrões por parte dos átomos.

Figura 1 Esquema organizador da Unidade 1 (11º ano) - "Materiais e Aplicações: Metais e Ligas Metálicas" [15]

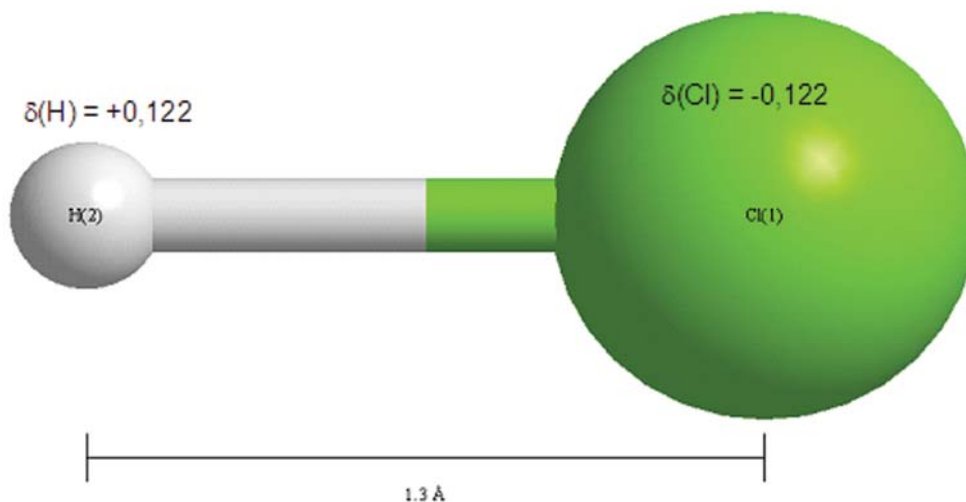


Figura 2 Imagem esquemática da molécula de ácido Clorídrico (HCl). δ representa a carga de cada um dos átomos

Após terem efectuado este simples cálculo matemático, os alunos facilmente chegarão a um valor de diferença de electronegatividade de 0,9 (a electronegatividade é uma grandeza adimensional), pelo que se torna facilmente perceptível que um dos átomos é mais electronegativo, ou seja, tem maior tendência para atrair para si os electrões. É ainda possível relacionar este valor (equação 3) com a percentagem de carácter iónico da ligação, levando assim a uma fácil percepção do tipo de ligação existente.

Embora uma ligação só possa ser estritamente classificada como apolar quando se verifica entre dois átomos idênticos (e com vizinhanças idênticas), os critérios de classificação normalmente aceites dos vários tipos de ligação química (embora tenham essencialmente um carácter indicativo) são os seguintes:

- Diferença de electronegatividade inferior a 0,5 – ligação covalente apolar.
- Diferença de electronegatividade compreendida entre 0,5 e 1,9 – ligação covalente polar.
- Diferença de electronegatividade igual ou superior a 1,9 – ligação iónica.

Assim, atendendo aos critérios de classificação das ligações químicas com base na diferença de electronegatividade entre os átomos ligados, os alunos facilmente concluirão que a ligação na molécula de HCl é uma ligação covalente polar.

Uma outra possibilidade é representar a molécula com a sua distribuição de densidade de carga (Figura 3). Através da visualização deste tipo de imagens torna-se facilmente compreensível para os alunos, que, apesar de os átomos de hidrogénio e de cloro estarem ligados por uma ligação covalente, a partilha do par electrónico não é igual, pois os átomos têm um comportamento diferente. Em vez disso, os electrões passam em média mais tempo na vizinhança de um dos átomos. Desta “partilha desigual” do par de electrões ligante resulta um aumento da densidade de carga próximo do átomo de cloro e uma consequente diminuição de densidade de carga junto do átomo de hidrogénio, que se deve à diferente electronegatividade dos átomos. Realça-se também que

numa molécula os electrões de valência não estão localizados, mas existe uma partilha, mais ou menos desigual, dos mesmos. Esta concepção é extremamente facilitadora para a compreensão de vários conceitos de Química como, por exemplo, o conceito de ligações conjugadas e de ressonância.

Outra possibilidade, por exemplo, consiste na representação dos vários halogenetos de hidrogénio (Figura 4) e realçar como a diferença de electronegatividade entre os diferentes elementos influencia a maior ou menor polaridade da ligação bem como a influência que tem na carga que cada um dos elementos assume em cada uma das moléculas. Apresentando a carga que o hidrogénio tem em cada uma das moléculas (a do halogénio

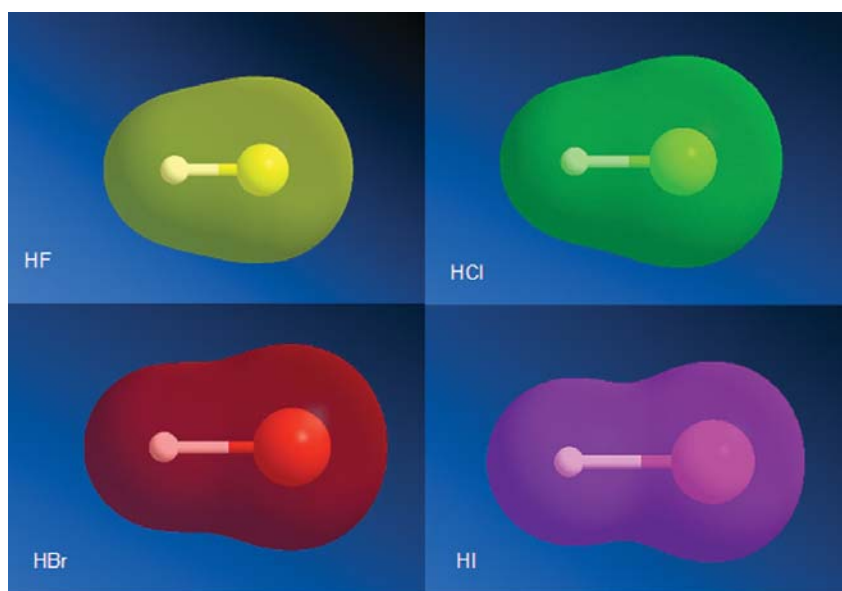


Figura 4 Distribuição da densidade de carga nas moléculas dos vários halogenetos de hidrogénio

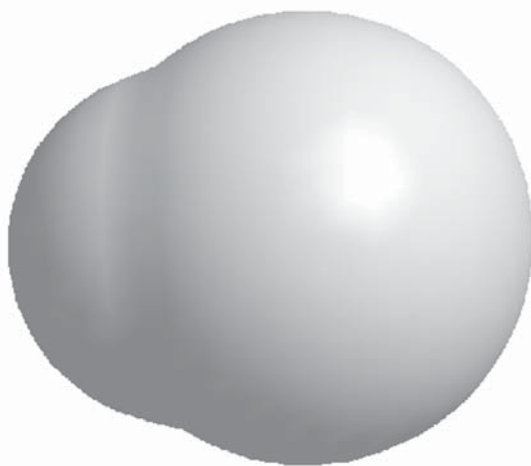


Figura 3 Distribuição da densidade de carga na molécula de ácido clorídrico

será sempre o seu simétrico) vai fazer o aluno consciencializar que o mesmo elemento pode ter cargas distintas em moléculas distintas. A posterior compreensão ou explicação por parte do professor do porquê deste facto, abre as portas para um ensino em que se privilegia a apreensão dos conteúdos e não a sua memorização.

Um outro campo a explorar é a introdução do conceito de dipolo. Se o aluno perceber que o dipolo é uma grandeza vectorial que depende das cargas em jogo e da distância a que se encontram umas das outras, será mais fácil entender a maior ou menor polaridade das moléculas diatómicas.

Uma vez introduzido este conceito os exemplos podem ser estendidos a moléculas poliatômicas. Um exemplo fácil e estimulante é a molécula do metano (Figura 5); cada uma das ligações é covalente polar ($\delta_{\text{H}} = +0,051$; $\delta_{\text{C}} = -0,206$), mas a molécula como um todo é apolar. Um exemplo deste tipo pode servir para iniciar o tema da estrutura molecular.

maior dificuldade em se sentirem motivados para o estudo de uma ciência que a todos os níveis é fundamental ser entendida por qualquer cidadão informado na sociedade de hoje.

É ainda de realçar que, apesar de uma grande maioria das escolas já se encontrar equipada com material informático (computadores, impres-

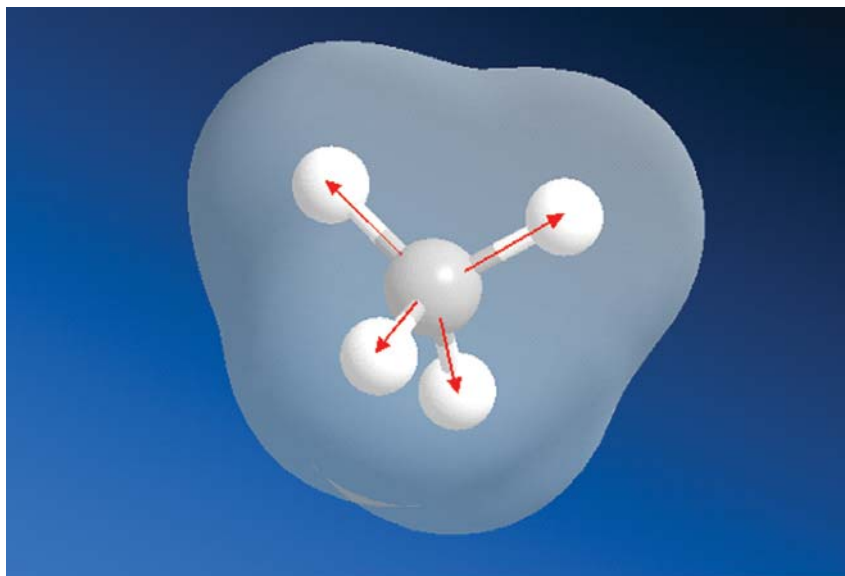


Figura 5 Distribuição da densidade de carga na molécula de metano e indicação dos dipolos a vermelho

CONCLUSÕES

No contexto de sala de aula é comum verificar que os alunos não conseguem estabelecer relações entre os vários conceitos abordados e que encaram a Química como uma área compartimentada. Esta dificuldade traduz-se, geralmente, num desinteresse crescente e, conseqüentemente, no insucesso escolar, tendência esta que tende a ser agravada pela incoerência do Currículo do Ensino Básico e Secundário no que diz respeito ao ensino da Química. O conceito de electronegatividade, mesmo que apresentado de forma simples, podia funcionar como o conceito aglutinador que conduzisse os alunos ao longo de todo, ou pelo menos de grande parte, do estudo desta disciplina.

De forma a melhorar o aproveitamento dos alunos seria benéfico que se procedesse, com alguma celeridade, à revisão do Currículo do Ensino Básico e Secundário no que à Química diz respeito. Na actual situação, é difícil vislumbrar um fio condutor e esse facto leva a que os alunos tenham uma

soras e *scanners*), a quantidade de *software* educacional, nomeadamente na área da ciência, é reduzido ou não se encontra disponível pelo facto de frequentemente ser extremamente dispendioso. Neste aspecto, o Ministério podia ter um papel importante ao negociar uma solução global para as nossas escolas junto dos vários agentes comerciais.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem os comentários e sugestões do avaliador desta comunicação que muito contribuíram para a versão final apresentada.

NOTA

¹Apesar de Z_{eff} ser habitualmente designado por carga nuclear efectiva, a designação mais correcta seria número atómico efectivo por se referir ao número de prótons que efectivamente exercem um potencial atractivo sobre um electrão, depois de considerado o efeito de blindagem dos outros electrões.

REFERÊNCIAS

- [1] L. Allen, "Evaluation and Test of Pauling's Electronegativity Scale", *Journal of Physical Chemistry* **104** (2000) 5867-5871.
- [2] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, Ithaca, New York: Cornell University Press, 1939.
- [3] A percentagem de carácter iónico pode também ser calculada através da relação quadrática de Hannay e Smith

$$\% \text{Carácter Iónico} = 1 - 0,16|\chi_A - \chi_B| + 0,35(\chi_A - \chi_B)^2$$
- Para maior detalhe ver : N. B. Hannay, C. P. Smyth, *Journal of the American Chemical Society* **68** (1946) 171-173.
- [4] R. S. Mulliken, *Journal of Chemical Physics* **3** (1935) 573-585.
- [5] W. Gordy, "A New Method of Determining Electronegativity from Other Atomic Properties", *Physical Review A* **69** (1946) 604-607.
- [6] A. Walsh, *Discussions Faraday Soc.* **2** (1947) 18.
- [7] J. Huheey, "The Electronegativity of Groups", *Journal of Physical Chemistry* (1965) 3284-3285.
- [8] R. Sanderson, *Relation of Stability Ratios to Pauling Electronegativities*, Department of Chemistry, State University of Iowa, Iowa, 1955.
- [9] A. Rochow, "A Scale of Electronegativity Based on Electrostatic Force", *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* **5** (1958) 264-268.
- [10] J. Hinze, "Electronegativity II. Bond and Orbital Electronegativities", *Journal of the American Chemical Society* **85(2)** (1963) 148-154.
- [11] L. Allen, "Electronegativity Is The Average One-Electron Energy of the Valence-Shell Electrons in Ground-State Free Atoms", *Journal of the American Chemical Society* **111** (1989) 9003-9014.
- [12] Para se verificar esta afirmação bastará no portal <http://portalisiknowledge.com> introduzir uma pesquisa sobre "electronegativity" ou "electronegativity scales".
- [13] M. Beleza, M. Cavaleiro, *Ciências Físico-Químicas - Guia Prático*. Lisboa, Portugal: Edições ASA, 2002.
- [14] Ministério da Educação, *Programa de Física e Química A - 10º ou 11º anos de Escolaridade*, Portugal, 2001.
- [15] Ministério da Educação, *Programa de Física e Química A - 11º ou 12º anos de Escolaridade*, Portugal, Março de 2003.
- [16] Ministério da Educação, *Programa de Química do 12º ano de Escolaridade*, Portugal, 2004.

ANETOL

Ainda a propósito da gripe A, circula um e-mail que afirma «O anis estrelado, amplamente cultivado na China, é o extracto-base (75%) da produção do comprimido Tamiflu, da Roche. Podemos usar o nosso anis mesmo - a erva-doce - pois esta erva possui as mesmas substâncias, ou seja, o mesmo princípio activo do anis estrelado», continuando com uma exaltação das virtudes curativas da erva-doce, qual panaceia universal de acordo com o e-mail.

Na realidade, o anis estrelado e a erva-doce, o «nosso anis mesmo», são plantas completamente diferentes que apresentam em comum o facto de con-

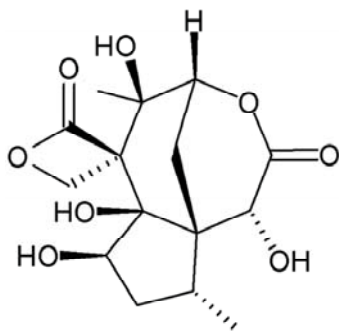
terem grandes quantidades de anetol, o monoterpene fenólico que lhes confere as características organolépticas distintivas. Na realidade, também há duas espécies de anis estrelado, o chinês e o japonês, e se o primeiro pode ser utilizado sem problemas o segundo é extraordinariamente tóxico, ou antes, alguns dos compostos naturais que contém, como o anisatin, são mortais se consumidos em doses não muito elevadas.

O fundo de verdade nesta lenda urbana é o facto de o ácido chiquímico, um polifenol abundante no anis estrelado e ausente na erva-doce, ser um precursor do oseltamivir, conhecido comercialmente como Tamiflu, ou seja, é necessária uma série complexa de

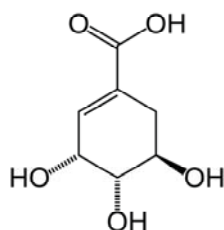
passos reaccionais para transformar este polifenol em oseltamivir.

Curiosamente, o composto que de facto ambos os anises apresentam em comum, o anetol, pode ser precursor de outro composto muito conhecido, infelizmente por outras razões: a para-metoxi-anfetamina (PMA), uma droga da família a que pertence o Ecstasy.

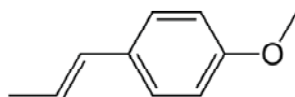
Palmira Silva



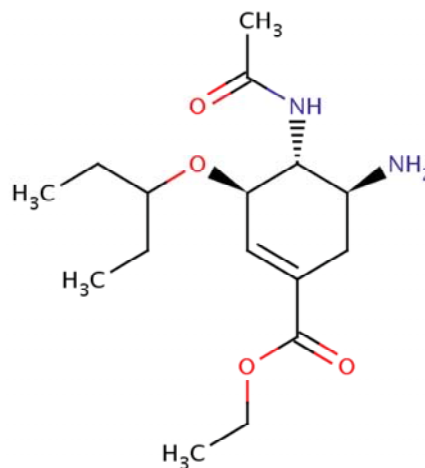
Anetol



Ácido chiquímico



Anisatin



Oseltamivir (Tamiflu)

ESTRELAS DO MAR SÃO FORTES ABSORVEDORAS DE CARBONO

Um estudo realizado por um grupo que envolve vários centros de investigação europeus e dos EUA (Lebrato *et al.*, *ESA Ecol. Monogr.*, doi: 10.1890/09-0553 (2009)) revelou que os animais marinhos como as estrelas do mar, lírios do mar e ouriços-do-mar retêm mais carbono, sob a forma de carbonato de cálcio, do que se pensava.

Num estudo que pretende reavaliar a contribuição daqueles animais mari-

nhos (equinodermes (*Phylum Echinodermata*)) no ciclo do carbono, estas são excelentes notícias.

O estudo envolveu a recolha de amostras de animais adultos (estrelas do mar, ouriços-do-mar e lírios do mar, entre outros), em águas superficiais e profundas a várias latitudes do Oceano Atlântico, e estimaram depois a contribuição do conteúdo em carbono de equinodermes recolhidos a várias latitudes de outros oceanos. Deste modo, estimaram a quantidade de carbonato de cálcio que os animais

armazenam nos seus corpos e com que rapidez o carbono é enterrado no fundo dos mares após a morte dos animais e a sedimentação dos seus corpos.

Estimaram então que os equinodermes capturam 0,1 gigatoneladas de carbono por ano. Segundo outros investigadores, estes podem ser valores subestimados dado que há vastas regiões do Pacífico Equatorial onde existem enormes quantidades de biomassa de equinodermes que ainda não está bem estudada.

Os equinodermes encontram-se em todos os ecossistemas, a todas as profundidades, e o seu corpo pode ser constituído por até 80% de CaCO_3 .

Uma questão que este estudo levanta é a do efeito da acidificação dos mares devido à absorção do dióxido de

carbono atmosférico (cuja concentração está a aumentar) sobre os equinodermes e sobre a sua capacidade de reter o carbono.

Um aumento de acidez pode aumentar a dissolução dos sedimentos que derivam dos equinodermes, o que poderá

ser (ou talvez já o seja actualmente) um sinal dos efeitos de acidificação.

(Adaptado de *Nature News* de 7 de Janeiro)

Jorge Morgado

NANOMEDICINA

Segundo um conjunto de artigos publicados recentemente (*J. Phys. D: Applied Physics* **42** (2009) 220301, 224001, 224002, 224303) nanopartículas magnéticas podem ser usadas para diagnosticar, monitorizar e tratar uma vasta gama de doenças e ferimentos. As nanopartículas magnéticas são usualmente produzidas a partir de magnetite comum de óxido de ferro e depois recobertas com um material biocompatível, que estabiliza e protege as nanopartículas à medida

que se deslocam através do corpo. A cobertura é muitas vezes constituída por ácidos gordos. Moléculas sensoriais, corantes ou fármacos podem ser ligadas às nanopartículas através de variados grupos de ancoramento. Estas nanopartículas funcionalizadas podem ser deslocadas até um local específico usando campos magnéticos externos. Este tipo de nanopartículas têm estado a ser testadas *in vivo* para tratar danos no coração de ratos e para destruir, por acção do calor gerado por campos magnéticos alternados (AC), células tumorais (porque são mais sensíveis) em humanos.

Esta técnica tem sido usada para tratar, em particular, formas severas de cancro do cérebro em catorze pacientes e tem sido também usada para tratar cancro da próstata. Estes avanços têm sido conseguidos através de um significativo investimento na síntese e funcionalização das nanopartículas (adaptado de *Materials Today*, Dezembro de 2009).

Jorge Morgado

DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS BIODEGRADÁVEIS

A medicina está evoluir no sentido de conseguirmos diagnosticar e tratar doenças *in loco*, ou seja, através da utilização de nanodispositivos que, circulando através da nossa corrente sanguínea, possam diagnosticar o mau funcionamento e tratar localmente as células e tecidos. Os fármacos serão assim libertados apenas no local adequado sem expor as restantes células, as quais podem ser também negativamente afectadas. Para atingir este fim, estudam-se possibilidades de usar dispositivos inteligentes, capazes de processar a informação recolhida localmente e actuar em conformidade. Os dispositivos actuais são ou implantes temporários feitos de polímeros biodegradáveis com funcionalidade electrónica limitada ou

implantes permanentes feitos de silício que têm que de ser cirurgicamente removidos depois de cumprirem a sua tarefa. Pretende-se fabricar dispositivos que combinem o melhor destas duas abordagens: uso de polímeros biodegradáveis ou biocompatíveis e capazes de desempenharem funções mais complexas, como as conseguidas com os dispositivos de silício. A solução é a electrónica orgânica com base em polímeros biodegradáveis. Um passo relevante foi anunciado recentemente (*Advanced Materials* **21** (2009) 1). Um grupo da Universidade de Stanford (EUA) fabricou um transistor orgânico (envolvendo o uso de polímeros biodegradáveis e o uso, em muito pequenas quantidades, de ouro e prata biocompatíveis) que se mantém operacional quando exposto a ambientes aquosos, degradando-se ao fim de 50 dias. Os próximos passos

serão o fabrico de outros componentes electrónicos com base em biomateriais e outros sistemas electrónicos orgânicos, que possam ser integrados em dispositivos mais complexos e implantados no corpo humano. (adaptado de *Materials Today*, Dezembro de 2009).

Jorge Morgado

NOVAS PERSPECTIVAS NO COMBATE ÀS DOENÇAS PROVOCADAS POR AMILÓIDES

Os amilóides são depósitos de proteínas fibrosas associados a várias doenças como Alzheimer e Parkinson. Pensava-se que as fibrilas de amilóides (estruturas em forma de corda formadas por fibras de proteínas) eram inertes, mas que poderia haver fases tóxicas (que ocorriam durante a sua formação) que poderiam danificar células e provocar doenças. Contudo, num artigo publicado no passado dia 4 de Dezembro (*Journal of Biological Chemistry* **284** (2009) 34272) um conjunto de investigadores da Universidade de Leeds no Reino Unido, mostrou que a citotoxicidade dos amilóides aumenta com a fragmentação das fibrilas. Ou seja, são as próprias fibrilas que são tóxicas e são-no tanto mais

quanto mais pequenas.

Os depósitos de amilóides podem acumular-se em muitos locais diferentes do corpo ou podem ficar localizados num órgão ou tecido particular, provocando uma gama de diferentes doenças. Esses depósitos podem, por exemplo, ser encontrados no cérebro, no caso dos pacientes que sofrem de Alzheimer ou Parkinson. O processo de formação desses depósitos (por auto-organização) é uma consequência natural da idade, já que 85% de todas as doenças causadas por depósitos de amilóides ocorrem em idades acima dos sessenta anos.

A razão porque as fibrilas amilóides mais pequenas são mais tóxicas do que as mais longas permanece por desvendar, embora se pense que as

mais pequenas se infiltram mais facilmente nas células. Por desvendar permanece também o processo de formação das fibras mais pequenas: se se formam naturalmente quando se dá a auto-organização das fibrilas de amilóides ou se resultam da desagregação e fragmentação das fibras maiores (*Public release* de 4 de Dezembro de 2009 da Universidade de Leeds).

Jorge Morgado

SÍNTESE MAIS FÁCIL DE ÉSTERES

A produção de biocombustível e ésteres (usados no fabrico de fragrâncias e tecidos) pode, potencialmente, tornar-se mais verde, barata e mais eficiente, graças ao trabalho desenvolvido por um grupo da Universidade de Harvard (EUA). Estes investigadores descobriram que partículas de ouro recobertas com oxigénio podem oxidar, selectivamente, uma variedade de alcoóis e aldeídos, podendo este processo ocorrer a baixas temperaturas (próximo da temperatura ambiente).

Os ésteres derivam da reacção de ácidos carboxílicos com alcoóis (como metanol ou fenol). Este grupo demonstrou que o oxigénio adsorvido à superfície do ouro actua como uma base de Brønsted, provocando a cisão da ligação O-H do metanol. O intermediário adsorvido (metoxi) actua depois como um nucleófilo atacando centros deficitários electrónicos em vários aldeídos para formar ésteres metílicos.

Esta via pode oferecer alternativas mais amigas do ambiente e mais efi-

cientes para a produção de ésteres de baixo peso molecular, podendo também contribuir para o desenvolvimento de fontes alternativas para produção de biocombustíveis. Falta no entanto verificar se este processo pode ser implementado em grande escala, considerando, em particular, o custo do ouro e a estabilidade do catalisador sob condições operacionais. (de *Chemistry World, News, Royal Society of Chemistry*, 4 de Dezembro)

Jorge Morgado

ANÁLISE DA VERDURA DAS ACTIVIDADES LABORATORIAIS DO 10º ANO DO ENSINO SECUNDÁRIO

DOMINIQUE A. COSTA¹, M. GABRIELA T. C. RIBEIRO^{2*}
E ADÉLIO A. S. C. MACHADO¹

Apresenta-se uma análise da verdura das actividades laboratoriais propostas no programa de Química do 10º ano do Ensino Secundário, usando como instrumento de análise uma métrica de verdura, semi-quantitativa mas holística, recentemente desenvolvida, a Estrela Verde (EV). A análise permitiu confirmar a utilidade da EV para a avaliação da verdura de actividades laboratoriais e detectar as experiências do referido programa que devem ser revistas ou substituídas porque são problemáticas quanto à verdura, nomeadamente quanto à segurança.

Uma análise da literatura sobre a pedagogia da Química Verde (QV) [1] mostra que o principal objectivo do ensino da química segundo este novo paradigma é preparar os alunos, futuros cidadãos, para compreender e contribuir para o Desenvolvimento Sustentável – um objectivo razoável e aliciante, não só porque a QV é um veículo privilegiado para a aquisição de uma visão integrada da química com o meio ambiente e a economia, mas também porque pode contribuir para que se possa eliminar a visão negativista de muitos cidadãos sobre a química. Por exemplo, Hjerresen [2] refere a importância de usar a QV para envolver os jovens na preservação de um planeta saudável para as gerações futuras – ligando explicitamente o respectivo ensino à promoção do Desenvolvimento Sustentável. Também, Braun *et al* [3] referem que, com a inclusão da QV no ensino da Química desde o Ensino Básico, os alunos de todas as áreas, e não apenas os de ciências, terão oportunidades adicionais para relacionar a química com o mundo real. Para além disso, mesmo que muitos destes estudantes não venham a ser químicos, virão a ser profissionais que podem utilizar a QV e outras práticas sustentáveis a nível

científico, técnico, ético, político ou económico – até porque poderão fazê-lo mesmo como simples cidadãos [4]. Por outro lado, os profissionais que vão ser futuros químicos e engenheiros químicos têm de ser equipados com as ferramentas necessárias para suportar e promover proactivamente a Sustentabilidade – ou, mais pragmaticamente, devem estar preparados para vencer as barreiras que as indústrias enfrentam/enfrentarão para se adaptarem aos novos tipos de actividades e mercados criados pelo Desenvolvimento Sustentável.

A inclusão da QV no processo de ensino-aprendizagem implica desafios para os professores de todos os níveis de ensino, que têm de incorporar no seu ensino novos conceitos e objectivos verdes, de forma a permitirem aos seus alunos uma visão inovadora da Química, mais optimista do que a que tem a sociedade actual, sem comprometer a integridade do conhecimento químico [5]. Em conclusão, há lugar para se realizar trabalho de investigação científico-pedagógico sobre o ensino da QV e a criação de ferramentas para este fim.

Neste Departamento, tem-se dado atenção ao ensino da QV, quer em cadeiras dirigidas ao seu ensino nos cursos de Química (nomeadamente “QV e Engenharia da Sustentabilidade” e “Química Industrial Verde”), quer por actividades realizadas na cadeira de “Didáctica da Química” e em Projec-

tos e Seminários de Estágio dirigidas aos alunos dos Cursos Educacionais, quer por desenvolvimento de um Doutoramento em curso por um dos autores (DAC), que visa o desenvolvimento de experiências laboratoriais que possibilitem a prática da QV no Ensino Secundário [6]. O presente estudo, que se integra nesta linha de trabalho, teve por objectivo avaliar a verdura [7] das actividades laboratoriais (AL) propostas nos programas da disciplina de Física e Química do 10º Ano A actualmente em vigor [8], utilizando uma métrica holística construída e apresentada recentemente – a Estrela Verde (EV) (“Green Star”, GS) [9, 10]. Mais concretamente, o estudo visou identificar as experiências que são problemáticas quanto à verdura, nomeadamente quanto à segurança, e formular algumas sugestões relativamente à sua melhoria ou substituição.

CONSTRUÇÃO DA EV

Como a EV está ainda em fase de divulgação [9, 10] começa-se por uma apresentação breve da sua filosofia e técnica de construção. Quanto à filosofia, a EV é uma métrica holística que entra em linha de conta simultaneamente com todos os Princípios da QV [11, 12], aplicáveis a cada situação laboratorial em análise (reação de síntese, etc.) para avaliação da verdura desta. A ideia básica da EV é a construção de uma estrela constituída por tantas pontas quantos os Princípios usados na avaliação da verdura e

* Autora para correspondência (gribeiro@fc.up.pt).

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

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

em que o comprimento de cada ponta é proporcional ao grau de cumprimento do respectivo princípio – uma visão semi-quantitativa da verdura pode ser obtida por apreciação visual, simples e imediata, da área da EV: a verdura é tanto maior quanto maior for a área. Para construir a EV referente a uma experiência, começa por inventariar-se todas as substâncias intervenientes: reagentes, produtos e coprodutos obtidos, catalisadores, solventes, agentes de purificação, secantes, resíduos formados, etc.

Para avaliar os riscos para a saúde e para o ambiente, inflamabilidade e reactividade, recolhem-se os símbolos indicativos das frases de risco/segurança usados na rotulagem das embalagens de todas estas substâncias e, ainda, informações sobre se constituem ou são obtidas de matérias-primas renováveis, bem como sobre a sua degradabilidade. A partir das informações obtidas, a cada substância são atribuídas pontuações numa escala de 1 (benignidade máxima) a 3, seguindo critérios que foram definidos

tendo em vista o objectivo e a exequibilidade de utilização, e que são apresentados na Tabela 1. Pontuam-se também as substâncias de acordo a sua degradabilidade e se são ou não provenientes de matérias-primas renováveis, seguindo os critérios também apresentados na mesma tabela. A EV é construída atribuindo a pontuação 1, 2 ou 3 (máximo de verdura) a cada um dos Doze Princípios da QV de acordo com os critérios definidos na Tabela 2.

Tabela 1 Critérios para a classificação das substâncias para construção das EV (p_1 = pontuação)

a) Riscos para a saúde humana e o ambiente das substâncias envolvidas		
Riscos	Símbolos de risco	P_1
Saúde	C - corrosivo T - tóxico T ⁺ - muito tóxico	3
	Xn - prejudicial Xi - irritante	2
	Nenhuma indicação	1
Ambiente	N - perigoso para o ambiente	3
	Nenhuma indicação	1
b) Riscos de acidente das substâncias envolvidas		
Riscos	Símbolos de risco	
Saúde	C - corrosivo T - tóxico T ⁺ - muito tóxico	3
	Xi - irritante Xn - prejudicial	2
	Nenhuma indicação	1
Inflamabilidade	F - muito inflamável F ⁺ - extremamente inflamável	3
	Nenhuma indicação	1
Reactividade	E - explosivo	3
	O - agente oxidante	3
	Nenhuma indicação	1
c) Degradabilidade e renovabilidade das substâncias envolvidas		
Características	Critérios	
Degradabilidade	Não degradáveis ou que não possam ser tratados para se obter a sua degradação em produtos de degradação inócuos	3
	Possam ser tratadas para obter degradação com produtos de degradação inócuos	2
	Degradáveis com produtos de degradação inócuos	1
Renovabilidade	Não renováveis	3
	Renováveis	1

Tabela 2 Componentes e pontuações para construção das EV (p_2 = pontuação)

Princípio da QV	CrITÉrios	P_2
P1 – Prevenção	Todos os resíduos são inócuos ($p_1=1$, tabela 1a)	3
	Resíduos que envolvam um risco moderado para a saúde e ambiente ($p_1=2$, tabela 1a, pelo menos para uma substância, sem substâncias com $p_1=3$)	2
	Formação de pelo menos um resíduo que envolva um risco elevado para a saúde e ambiente ($p_1=3$, tabela 1a)	1
P2- Economia atômica	Reacções sem reagentes em excesso (<10%) e sem formação de coprodutos	3
	Reacções sem reagentes em excesso (<10%) e com formação de coprodutos	2
	Reacções com reagentes em excesso (>10%) e sem formação de coprodutos	2
	Reacções com reagentes em excesso (>10%) e com formação de coprodutos	1
P3 – Sínteses menos perigosas	Todas as substâncias envolvidas são inócuas ($p_1=1$, tabela 1a)	3
	As substâncias envolvidas apresentam um risco moderado para a saúde e ambiente ($p_1=2$, tabela 1a, pelo menos para uma substância, sem substâncias com $p_1=3$)	2
	Pelo menos uma das substâncias envolvidas apresenta um risco elevado para a saúde e ambiente ($p_1=3$, tabela 1a)	1
P5 – Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras	Os solventes e as substâncias auxiliares não existem ou são inócuos ($p_1=1$, tabela 1a)	3
	Os solventes e as substâncias auxiliares usadas envolvem um risco moderado para a saúde e ambiente ($p_1=2$, tabela 1a, pelo menos para uma substância, sem substâncias com $p_1=3$)	2
	Pelo menos um dos solventes ou uma das substâncias auxiliares usadas envolve um risco elevado para a saúde e ambiente ($p_1=3$, tabela 1a)	1
P6 – Planificação para conseguir eficácia energética	Temperatura e pressão ambientais	3
	Pressão ambiental e temperatura entre 0°C e 100°C que implique arrefecimento ou aquecimento	2
	Pressão diferente da ambiental e/ou temperatura muito afastada da ambiental	1
P7 – Uso de matérias primas renováveis	Todos os reagentes/matérias-primas/recursos envolvidos são renováveis ($p_1=1$, tabela 1c)	3
	Pelo menos um dos reagentes/matérias-primas/recursos envolvidos é renovável, não se considera a água ($p_1=1$, tabela 1c)	2
	Nenhum dos reagentes/matérias-primas/recursos envolvidos é renovável, não se considera a água ($p_1=3$, tabela 1c)	1
P8 – Redução de derivatizações	Não se usam derivatizações	3
	Usa-se apenas uma derivatização ou operação semelhante	2
	Usam-se várias derivatizações ou operações semelhantes	1
P9 – Catalisadores	Não se usam catalisadores ou os catalisadores são inócuos ($p_1=1$, tabela 1a)	3
	Utilizam-se catalisadores que envolvem um risco moderado para a saúde e ambiente ($p_1=2$, tabela 1a)	2
	Utilizam catalisadores que envolvem um risco elevado para a saúde e ambiente ($p_1=3$, tabela 1a)	1
P10 – Planificação para a degradação	Todas as substâncias envolvidas são degradáveis com os produtos de degradação inócuos ($p_1=1$, tabela 1c)	3
	Todas as substâncias envolvidas que não são degradáveis podem ser tratados para obter a sua degradação com os produtos de degradação inócuos ($p_1=2$, tabela 1c)	2
	Pelo menos uma das substâncias envolvidas não é degradável nem pode ser tratado para obter a sua degradação com produtos de degradação inócuos ($p_1=3$, tabela 1c)	1
P12 – Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes	As substâncias envolvidas apresentam um baixo risco de acidente químico ($p_1=1$, tabela 1b)	3
	As substâncias envolvidas apresentam um risco moderado de acidente químico ($p_1=2$, tabela 1b, pelo menos para uma substância, sem substâncias com $p_1=3$)	2
	As substâncias envolvidas apresentam um risco elevado de acidente químico ($p_1=3$, tabela 1b)	1

Para o máximo de verdura, a pontuação será 3 para todos os princípios e obtém-se uma estrela de área (verdura) máxima, conforme se mostra na Fig. 1a.



Figura 1a Estrela de verdura máxima

Quando a verdura é mínima a pontuação é de 1 para todos os princípios e a área verde da EV será nula (Fig. 1b).

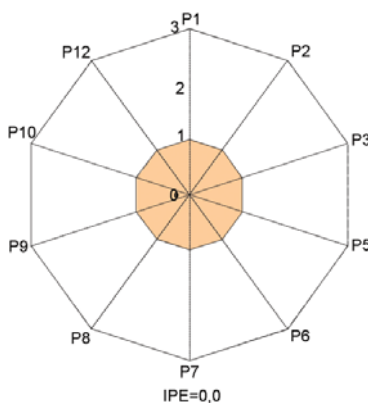


Figura 1b Estrela de verdura mínima

Nestas figuras, a EV é representada apenas com dez dimensões, cada uma referente a um princípio da QV – os quarto e décimo primeiro princípios foram excluídos, já que no ensino secundário não se costuma realizar a planificação de novos produtos químicos, à qual estes princípios se aplicam. Nas actividades laboratoriais analisadas adiante foi usada uma EV simplificada, pois foram excluídos os segundo, terceiro, oitavo e nono princípios, dirigidos à realização de reacções químicas, uma vez que nenhuma das actividades laboratoriais analisadas envolve reacções de síntese.

Como pode ser difícil a comparação visual das estrelas quando estas são usadas para avaliar o aumento de verdura na optimização de protocolos experimentais, calculou-se também a percentagem de área verde da estre-

la relativamente à área da estrela de verdura máxima, (100 x área verde da estrela/área verde da estrela de verdura máxima) – a que se chamou Índice de Preenchimento da Estrela (IPE). Para a estrela de verdura máxima, IPE=100, para a de mínima, IPE=0.

ACTIVIDADES LABORATORIAIS AVALIADAS

As actividades laboratoriais avaliadas, que correspondem à totalidade das actividades propostas no programa em vigor do 10º ano do Ensino Secundário, são apresentadas no Quadro 1.

Quadro 1 Actividades laboratoriais avaliadas [8]

AL 0.1 - SEPARAR E PURIFICAR (UTILIZAÇÃO DE TÉCNICAS DE SEPARAÇÃO DE MISTURAS)

Separar os componentes de uma mistura por decantação, filtração e destilação simples e fraccionada

Actividade 1 - Separar os componentes de uma mistura de água, sal e solo

Separação efectuada através de uma decantação, seguida de filtração e destilação simples.

Actividade 2 - Separar uma gordura de uma solução aquosa

- Mistura de óleo ou azeite e água separada por decantação.
- Mistura de hexano e água separada por decantação.

Actividade 3 - Dessalinizar água do mar ou água salgada

A água do mar ou água salgada é dessalinizada por destilação simples.

Actividade 4 - Separar dois líquidos miscíveis

Uma mistura de água e acetona é separada por destilação fraccionada.

AL 1.1 - MEDIÇÃO EM QUÍMICA

Efectuam-se medições de volume, massa e temperatura.

AL 1.2 - ANÁLISE ELEMENTAR POR VIA SECA

Procede-se à queima de diversos sais e observa-se para cada amostra a cor conferida à chama e o tipo de espectro, concluindo-se sobre o catião presente em cada amostra

Actividade 1 - Análise do cloreto de sódio

Actividade 2 - Análise do cloreto de bário

Actividade 3 - Análise do cloreto de cálcio

Actividade 4 - Análise do cloreto de potássio

Actividade 5 - Análise do cloreto de cobre(I)

Actividade 6 - Análise do cloreto de cobre(II)

Actividade 7 - Análise do cloreto de lítio

Actividade 8 - Análise do cloreto de estrôncio

AL 1.3 - IDENTIFICAÇÃO DE UMA SUBSTÂNCIA E AVALIAÇÃO DA SUA PUREZA

Actividade 1 - Determinação da densidade e da densidade relativa de um sólido

São utilizados cubos/ esferas/ lâminas de cobre, chumbo, alumínio, latão.

Actividade 2 - Determinação da densidade e da densidade relativa de um líquido

São utilizados dois líquidos: **a)** água; **b)** etanol.

Actividade 3 - Determinação do ponto de ebulição de um líquido

São utilizados dois líquidos: **a)** água; **b)** etanol.

Actividade 4 - Determinação do ponto de fusão de um sólido

São utilizadas as seguintes substâncias: **a)** enxofre (substância auxiliar utilizada – parafina); **b)** naftaleno (substância auxiliar utilizada – água); **c)** ácido salicílico (utiliza-se equipamento automático).

AL 2.1 - SOLUÇÕES E COLÓIDES

Actividade 1 - Preparação de soluções

Preparam-se soluções aquosas de tiosulfato de sódio

Actividade 2 - Preparação de colóides

Prepara-se um gel: **a)** por adição de uma solução saturada de acetato de cálcio a etanol absoluto; **b)** através da reacção entre ácido clorídrico (concentrado) e solução diluída de tiosulfato de sódio.

A partir dos dados coligidos do modo indicado atrás, recolheu-se informação acerca dos riscos para a saúde e para o ambiente, inflamabilidade, reactividade, etc., das substâncias envolvidas nas actividades (ver a Tabela 3).

Para cada uma das actividades foram construídas tabelas onde se indicam as características das componentes e pontuações para construir as EV, como por exemplo a Tabela 4 que se refere à actividade AL2.1. Na Fig. 2

apresentam-se as EV para cada uma das experiências avaliadas.

Tabela 3 Riscos para a saúde, ambiente e de acidente de todas as substâncias envolvidas

Reagentes	Actividades	Símbolos	Pontuação de riscos para a saúde	Pontuação de riscos para o ambiente	Pontuação de riscos de acidente
Acetato de cálcio	AL2.1 (2a)	-	1	1	1
Acetona	AL0.1 (4)	Xi, F	2	1	3
Ácido clorídrico	AL2.1(2b)	C	3	1	3
Ácido salicílico	AL1.3 (4c)	Xn	2	1	2
Dióxido de enxofre	AL2.1 (2b)	T, C	3	1	3
Água ^{1,2}	AL0.1 (1, 2a, 2b, 3, 4), AL1.3 (1, 2a, 2b, 3a, 4b), AL2.1 (1, 2a, 2b)	-	1	1	1
Azeite ^{1,2}	AL0.1 (2a),	F	1	1	3
Cloreto de bário	AL1.2 (2)	T	3	1	3
Cloreto de cálcio ²	AL1.2 (3)	Xi	2	1	2
Cloreto de cobre (I)	AL1.2 (5)	Xn, N	2	3	2
Cloreto de cobre (II)	AL1.2 (6)	Xn, N	2	3	2
Cloreto de estrôncio	AL1.2 (8)	Xi	2	1	2
Cloreto de lítio	AL1.2 (7)	Xn	2	1	2
Cloreto de potássio	AL1.2 (4)	-	1	1	1
Cloreto de sódio ^{1,2}	AL0.1 (1, 3), AL1.2 (1)	-	1	1	1
Enxofre	AL1.3 (4a)	F	1	1	3
Etanol	AL1.3 (2b, 3b), AL2.1 (2a)	F	1	1	3
Hexano	AL0.1 (2b)	Xn, F, N	2	3	3
Naftaleno	AL1.3 (4b)	Xn, N	2	3	2
Óleo de cozinha ^{1,2}	AL0.1 (2a)	F	1	1	3
Parafina	AL1.3 (4a)	-	1	1	1
Solo ^{1,2}	AL01 (1)	-	1	1	1
Tiosulfato de sódio pentahidratado	AL2.1(1, 2b)	-	1	1	1

¹ Renováveis

² Degradáveis com produtos de degradação inócuos

Tabela 4 Pontuações para construir as EV para as actividades laboratoriais AL2.1

Princípio da QV	EV17		EV18a		EV18b	
	p ₂	Explicação	p ₂	Explicação	p ₂	Explicação
P1 – Prevenção	3	Todos os resíduos são inócuos	3	Todos os resíduos são inócuos	1	Dióxido de enxofre (T, C), ácido clorídrico (C)
P5 – Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras	3	Substâncias auxiliares inócuas (água)	3	Substâncias auxiliares inócuas (água)	3	Substâncias auxiliares inócuas (água)
P6 – Planificação para conseguir eficácia energética	3	Temperatura e pressão ambientais	3	Temperatura e pressão ambientais	3	Temperatura e pressão ambientais
P7 – Uso de matérias primas renováveis	1	Tiosulfato de sódio não renovável	1	Substâncias não renováveis (acetato de cálcio e etanol)	1	Substâncias não renováveis (ácido clorídrico, tiosulfato de sódio)
P10 – Planificação para a degradação	1	Tiosulfato de sódio não degradável	1	Substâncias não degradáveis (acetato de cálcio e etanol)	1	Substâncias não degradáveis (dióxido de enxofre, ácido clorídrico, tiosulfato de sódio)
P12 – Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes	3	Baixo risco de acidente químico	1	Etanol (F))	1	Ácido clorídrico (C), enxofre (F), dióxido de enxofre (T, C)

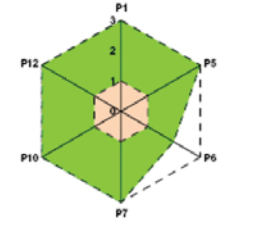
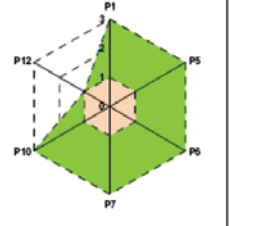
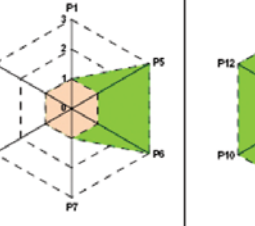
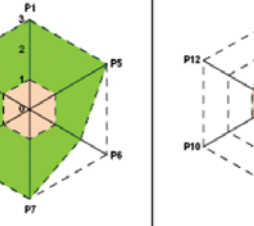

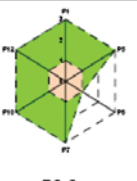
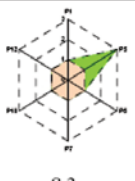
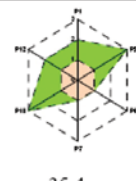
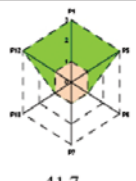
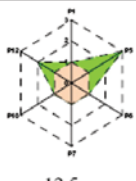
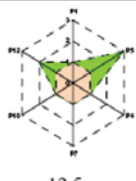
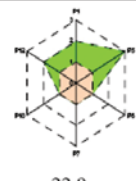
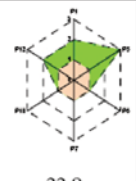
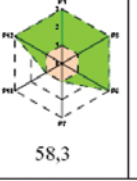
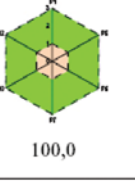
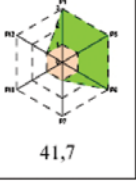
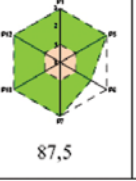
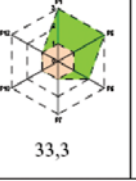
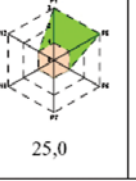
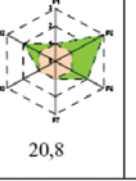
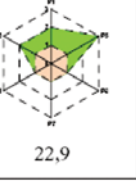
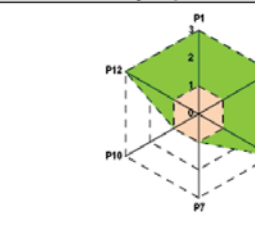
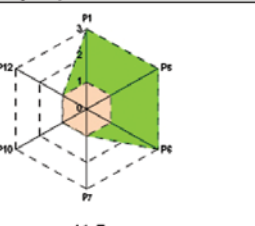
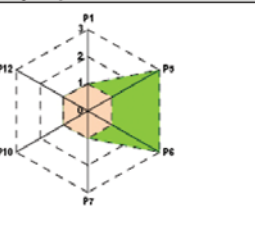
AL 0.1 Separar e purificar – utilização de técnicas de separação de misturas							
EV 1 Actividade 1 (separar os componentes de uma mistura de água, sal e solo)	EV 2 a) Actividade 2a (separar óleo ou azeite da água)	EV 2b) Actividade 2b (separar hexano da água)	EV 3 Actividade 3 (dessalinizar água do mar)	EV 4 Actividade 4 (separar acetona da água)			
 87,5	 75,0	 25,0	 87,5	 25,0			
AL 1.2. Análise elementar por via seca							
EV 5 Actividade 1 NaCl	EV 6 Actividade 2 BaCl ₂	EV 7 Actividade 3 CaCl ₂	EV 8 Actividade 4 KCl	EV 9 Actividade 5 CuCl	EV 10 Actividade 6 CuCl ₂	EV 11 Actividade 7 LiCl	EV 12 Actividade 8 SrCl ₂
 75,5	 8,3	 35,4	 41,7	 12,5	 12,5	 22,9	 22,9
AL 1.3 Identificação de uma substância e avaliação da sua pureza							
EV 13 Actividade 1	EV 14a Actividade 2a água	EV 14b Actividade 2b etanol	EV 15a Actividade 3a água	EV 15b Actividade 3b etanol	EV 16a Actividade 4a enxofre	EV 16b Actividade 4b naftaleno	EV 16c Actividade 4c ác. salicílico
 58,3	 100,0	 41,7	 87,5	 33,3	 25,0	 20,8	 22,9
AL 2.1 – Soluções e colóides							
EV17 Actividade 1 Preparação da solução	EV 18a Actividade 2a Preparação do colóide 1	EV18b Actividade 2b Preparação do colóide 2					
 58,3	 41,7	 25,0					

Figura 2 Estrelas Verdes (os números por baixo das EV são os respectivos IPE)

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

AL 0.1 Separar e purificar – utilização de técnicas de separação de misturas. As diversas EV para este grupo mostram que para todas as actividades o quinto princípio tem a pontuação 3, por não se utilizarem substâncias auxiliares. Por mera comparação visual verifica-se que a EV apresenta

uma área próxima da máxima para as actividades 1 e 3, “separar os componentes de uma mistura de água, sal e solo” (EV1), e “dessalinizar a água do mar ou água salgada” (EV3), respectivamente. Nestas actividades as substâncias usadas são renováveis e degradáveis, logo a pontuação dos sétimo e décimo princípios é máxima. Por outro lado, os riscos para a saúde

de e ambiente e os riscos de acidente químico são baixos devido à benignidade das substâncias, logo a pontuação dos primeiro e décimo segundo princípios é também máxima. Para o sexto princípio, a pontuação é 2, pois realiza-se uma destilação e as experiências decorrem a uma temperatura superior à temperatura ambiente. Para a actividade 2a, “separação do

óleo ou do azeite da água” (EV2a), a EV apresenta uma área verde mais reduzida. Embora a pontuação do sexto princípio seja 3, pois a experiência é realizada à temperatura ambiente, a pontuação do décimo segundo princípio é 1, atendendo a que o óleo e o azeite são inflamáveis. Para as actividades 2b e 4, “separar hexano da água” (EV2b), e “separar água da acetona” (EV4), respectivamente, a área da EV é muito reduzida. Na primeira actividade, a utilização do hexano (Xn, F, N) reduz a pontuação dos primeiro, sétimo, décimo e décimo segundo princípios a 1, porque se trata de uma substância que apresenta riscos elevados para o ambiente, não é renovável, não é degradável e apresenta riscos elevados de acidente. Por outro lado, a utilização da acetona (Xi, F) na actividade 4 reduz também a pontuação dos sétimo, décimo e décimo segundo princípios a 1, pois é uma substância não renovável, não degradável e apresenta riscos elevados de acidente. A pontuação do primeiro princípio é 2, pois a acetona apresenta risco moderado para a saúde. Como a actividade 2b é realizada à temperatura ambiente a pontuação do sexto princípio é máxima, mas para a actividade 4 essa pontuação é reduzida para 2, pois esta envolve uma destilação. No sentido de aumentar a verdura destas duas actividades laboratoriais poderia eliminar-se o hexano na actividade 2b e substituir a acetona por etanol na actividade 4, sem prejuízo dos objectivos propostos.

AL 1.1 - Medição em Química. Nesta actividade não foi construída qualquer EV, pois apenas se efectuam medições de volume, massa e temperatura.

AL 1.2 - Análise elementar por via seca. As diversas EV para este grupo mostram que para todas as actividades o sexto princípio tem a pontuação 1 e o quinto princípio 3, pois as experiências decorrem a uma temperatura muito afastada da temperatura ambiente e não se utilizam substâncias auxiliares, respectivamente. No que se refere ao sétimo e décimo princípios a pontuação é sempre 1, excepto para as actividades 1 e 3, pois o cloreto de sódio é considerado renovável e degradável e o cloreto de cálcio degradável. A pontuação para o primeiro

e décimo segundo princípios dependem, respectivamente, da benignidade e do risco de acidente químico apresentado pelas diversas substâncias usadas.

A EV apresenta uma área verde elevada para a actividade 1, “análise do cloreto de sódio” (EV5), atendendo à benignidade e baixo risco de acidente químico apresentado por este composto, o que implica uma pontuação de 3 para primeiro e décimo segundo princípios. Para a actividade 4, “análise do cloreto de potássio” (EV8), a EV apresenta uma área verde mais reduzida. Embora a benignidade e baixo risco de acidente químico apresentado pelas substâncias usadas impliquem também uma pontuação de 3 para primeiro e décimo segundo princípios, a pontuação mínima para os sétimo e décimo princípios, pois as substâncias não são renováveis nem degradáveis, provoca neste caso uma diminuição da área da EV.

Para as actividades 3, 7 e 8, “análise do cloreto de cálcio” (EV7), “análise do cloreto de lítio” (EV11) e “análise do cloreto de estrôncio” (EV12), as EV apresentam uma área ainda mais reduzida. O cloreto de cálcio (Xi), o cloreto de lítio (Xn) e o cloreto de estrôncio (Xi) apresentam riscos moderados para a saúde e de acidente químico, o que reduz a pontuação do primeiro e do décimo segundo princípios para 2. Para a actividade 3, como o cloreto de cálcio é uma substância degradável com produtos de degradação inócuos, a pontuação do décimo princípio é de 3 e a área da EV não se reduz tanto como para as actividades 7 e 8, em que os cloretos de lítio e estrôncio envolvidos não são degradáveis. Para as actividades 5 e 6, “análise do cloreto de cobre(I)” (EV9) e “análise do cloreto de cobre(II)” (EV10), as áreas das EV são muito reduzidas. Nestas actividades os riscos para a saúde e de acidente químico são também moderados, mas o risco para o ambiente do cloreto de cobre (Xn, N) é elevado e a área verde reduz-se mais, pois a pontuação do primeiro princípio é 1. Para a actividade 2, “análise do cloreto de bário” (EV2), a área da EV reduz-se ainda mais, pois os riscos para a saúde e de acidente químico do cloreto de bário (T) são elevados,

o que leva à redução da pontuação do primeiro e décimo segundo princípios para 1. Seria aconselhável não utilizar o cloreto de bário, atendendo à sua toxicidade (T), nem os cloretos de cobre(I) e (II), atendendo aos riscos que apresentam para o ambiente (N). A utilização de apenas as outras quatro substâncias parece não colocar em causa os objectivos propostos para a actividade.

AL 1.3 - Identificação de uma substância e avaliação da sua pureza.

As diversas EV para este grupo mostram que, para todas as actividades, o quinto princípio tem a pontuação 3 por não se utilizarem substâncias auxiliares ou, quando usadas, serem inócuas. Para as actividades em que se determinam densidades, actividades 1 e 2, as experiências são realizadas à pressão e temperatura ambientes e a pontuação para o sexto princípio é 3. Para as actividades 3 e 4, em que se determinam pontos de ebulição e de fusão, as experiências são realizadas a temperatura superior à temperatura ambiente e a pontuação para o sexto princípio é 2 se a temperatura não exceder 100°C e 1 se exceder. A pontuação dos sétimo e décimo princípios reduz-se a 1 para todas as actividades, excepto para as actividades 2a e 3a, em que a única substância envolvida é a água, porque as substâncias envolvidas não são renováveis nem degradáveis. As pontuações para o primeiro e décimo segundo princípios dependem, respectivamente, da benignidade e do risco de acidente químico apresentado pelas diversas substâncias usadas.

Por mera comparação visual verifica-se que a EV apresenta uma área máxima para a actividade 2a, “determinação da densidade da água” (EV14a), em que a pontuação é de 3 para todos os princípios, já que a única substância usada é a água. Para a actividade 3a, “determinação do ponto de ebulição da água” (EV15a), a EV apresenta uma área verde mais reduzida, pois a pontuação do o sexto princípio é reduzida para 2 (experiência a temperatura superior à ambiente). Para a actividade 1, “determinação da densidade e da densidade relativa de um sólido” (EV13), a EV apresenta uma área verde mais reduzida. Usam-se

sólidos, com a forma de cubos/esferas, constituídos por metais (cobre, chumbo, alumínio e latão) que são reutilizados, não dando origem a resíduos. Não se consideram riscos para a saúde ou para o ambiente, nem riscos de acidente químico, logo a pontuação dos primeiro e décimo segundo princípios é 3. Como a actividade se realiza à temperatura ambiente a pontuação do sexto princípio é 3. Para o sétimo e décimo princípios a pontuação é reduzida a 1, pois os metais que constituem os sólidos não são renováveis nem degradáveis. Embora estes metais não sejam consumidos durante as experiências, considera-se que foram produzidos e eventualmente serão depositados no ambiente. Para as actividades 2b, 3b e 4a, “determinação da densidade do etanol” (EV14b), “determinação do ponto de ebulição do etanol” (EV15b), e “determinação do ponto de fusão do enxofre” (EV16a), respectivamente, a área verde é reduzida. Em todos os casos, para o primeiro princípio a pontuação é 3, atendendo à benignidade do etanol e do enxofre, mas a pontuação do décimo segundo princípio é reduzida para 1, pois tanto o etanol como o enxofre são inflamáveis.

Para a actividade 4c, “determinação do ponto de fusão do ácido salicílico” (EV16c), a EV apresenta uma área verde também reduzida. Para os primeiro e décimo segundo princípios a pontuação é reduzida a 2 pois o ácido salicílico (Xn) envolve riscos moderados para a saúde e de acidente químico. Para a actividade 4b, “determinação do ponto de fusão do naftaleno” (EV16b), a EV apresenta uma área muito baixa. A pontuação é reduzida a 1 para o primeiro princípio e a 2 para o décimo segundo princípio, pois o naftaleno (Xn, N) apresenta risco elevado para o ambiente e risco moderado de acidente químico. Seria aconselhável não utilizar o naftaleno atendendo aos riscos que apresenta.

AL 2.1 - Soluções e colóides. As diversas EV para este grupo mostram que, para todos os casos, o quinto e o sexto princípio têm a pontuação 3, por não se utilizarem substâncias auxiliares e as experiências se realizarem à temperatura ambiente. Por outro lado, a pontuação para o sétimo e décimo

princípios reduz-se sempre a 1, pois as substâncias utilizadas não são renováveis, nem degradáveis com produtos de degradação inócuos. Por mera comparação visual verifica-se que a EV para a actividade 1, “preparação da solução de tiosulfato de sódio” (EV17), apresenta uma área verde superior a 50% da máxima. A pontuação é de 3 para o primeiro e décimo segundo princípios, atendendo à benignidade dos materiais usados (água e tiosulfato de sódio). Para a actividade 2a, “preparação do colóide 1” (EV18a), a EV apresenta uma área mais baixa. A pontuação é reduzida a 1 para o décimo segundo princípio, pois o etanol é inflamável. Na actividade 2b, “preparação do colóide 2” (EV2b), a área da EV é ainda mais baixa. A pontuação é reduzida a 1 para o primeiro e para o décimo segundo princípios, pois as substâncias envolvidas, ácido clorídrico (C) e dióxido de enxofre (T, C), apresentam riscos elevados para a saúde e de acidente químico. Seria aconselhável a substituição destes compostos por reagentes mais benignos.

Discussão final. A análise anterior comprova a utilidade da EV para a avaliação da veracidade de actividades laboratoriais de nível mais elementar do que as que foram descritas nos artigos em que a métrica foi apresentada [9, 10]. Nomeadamente, a EV pode ser usada na avaliação prévia da veracidade de uma experiência a partir do respectivo protocolo, sem ser necessário realizá-la; permite uma avaliação semi-quantitativa da veracidade por mera análise visual (sem prejuízo da utilização do valor numérico do IPE) e a detecção dos aspectos responsáveis pela falta de veracidade e que podem ser revistos com vista à optimização desta; e é de construção simples, embora nem sempre seja possível obter todas as informações requeridas, nomeadamente no que se refere à degradabilidade das substâncias. Além disso, como a EV é sensível aos diversos factores que devem ser considerados quando se discute a veracidade de uma reacção, pois atende aos Doze Princípios da QV de forma global e sistemática, é uma métrica holística que proporciona uma avaliação de espectro largo. No gráfico da Fig. 3 resumem-se os resultados

obtidos na análise anterior mediante uma distribuição da frequência das experiências em função do respectivo IPE. O gráfico mostra que dois terços (16 em 24) das actividades laboratoriais apresentaram uma veracidade baixa (IPE < 50), o que aponta para a necessidade de sua revisão. Não foi objectivo deste artigo discutir os princípios orientadores que levaram à concepção dos actuais programas do Ensino Secundário nem as opções tomadas relativamente aos temas escolhidos para as experiências, mas simplesmente avaliar a veracidade das actividades laboratoriais propostas. Por essa razão não se sugerem actividades alternativas, embora se tenham indicado atrás algumas sugestões para melhorar a benignidade das experiências, nomeadamente para aumentar a segurança. Para este fim, devem eliminar-se actividades que envolvam a utilização de substâncias com risco elevado para a saúde (símbolos de rotulagem T, T⁺, C) e para o ambiente (N). As experiências laboratoriais devem permitir aos alunos aprender química utilizando reagentes benignos, sem prejuízo de os ensinar a identificar reagentes perigosos e a procurar alternativas intrinsecamente benignas. É de referir que estão disponíveis, em português, fichas de dados de segurança de produtos químicos (MSDS - a sigla abrevia a designação “Material Safety Data Sheet”) [13], cuja consulta deve ser incentivada no Ensino Secundário desde tão cedo quanto possível [14]. A utilização nos laboratórios de ensino de substâncias apenas inócuas tem importantes implicações nos custos de montagem e operação destes, permitindo, nomeadamente, a sua construção sem “hottes”, uma atitude praticada com êxito pela Universidade de Oregon, EUA, no âmbito do seu projecto de desenvolvimento do ensino da QV [15]. O embaratecimento dos custos dos laboratórios das escolas secundárias arrastará como consequência o facilitar da realização de experiências de química, que poderão ser feitas em maior número pelos alunos – o que é importante para despertar maior interesse pela química por parte destes e incentivá-los a seguir cursos de química. A este respeito, é interessante notar que um artigo recente [16] refere a importância de embutir veracidade nas caixas de ex-

periências (“quits”) de química usadas como brinquedos, consideradas muito importantes no despertar de vocações para a química e também usadas na “educação a distância” por alunos que estudam em casa [17].

estão numa fase inicial de aprendizagem de práticas laboratoriais, quer da sua consciencialização, tão precoce quanto possível, para o facto de a química envolver variados problemas de segurança – cuja ocorrência deve

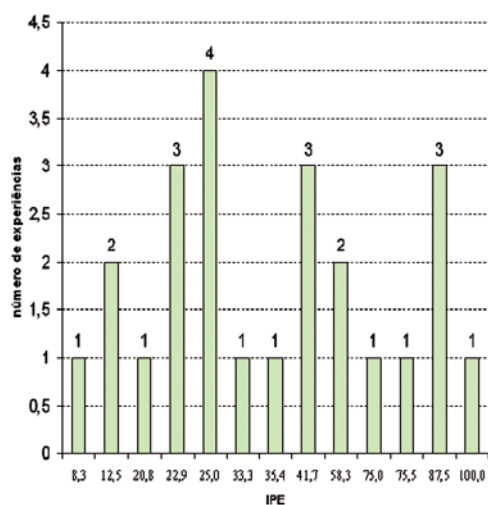


Figura 3 Frequência das experiências em função do IPE

Finalmente, uma observação lateral, mas que parece demasiado importante para ser omitida. Uma lacuna que se sente na componente laboratorial do programa de 10º ano é a total ausência de experiências de síntese, tanto mais de lamentar porque as técnicas laboratoriais, que monopolizam presentemente as actividades de laboratório propostas, podem ser facilmente integradas em experiências de química preparativa. A síntese corresponde à actividade que mais valias económicas traz à química antropogénica do mundo real e domina a Química Industrial. Aliás, os efeitos nocivos da química resultam fundamentalmente da sua prática à escala industrial e o ensino da química focado na Química Industrial permite explicitar mais ampla e incisivamente os objectivos da QV em termos do Desenvolvimento Sustentável.

CONCLUSÕES

Uma parte significativa das experiências laboratoriais prescritas no programa de química do 10º ano em vigor não são adequadas para integrar o ensino daquela ciência no âmbito do paradigma da QV e mostram mesmo alguns aspectos negativos quanto a riscos dos reagentes usados em termos de segurança. Embora a QV não se esgote na perseguição exclusiva da segurança, esta tem muita importância em termos quer da protecção dos alunos, particularmente quando estes

estar sempre presente na mente dos profissionais de química (e não só). As deficiências detectadas devem merecer especial atenção, porque a utilização de experiências de elevada veracidade significa segurança intrínseca, logo menos restrições à sua realização em escolas do ensino secundário com laboratórios pior preparados para garantir segurança (por exemplo, sem ventilação ou com “hottes” em número limitado) – e, portanto, permite proporcionar aos estudantes do secundário um acesso mais alargado e com menores custos a experiências de química, o que pode ser muito importante para os motivar para seguirem actividades profissionais no domínio da química. Em suma, química mais verde, significa química que pode ser mais facilmente praticada em laboratório – e mais amplamente divulgada pela via experimental.

REFERÊNCIAS

[1] P. Anastas, F. Wood-Black, T. Masciangioli, E. McGowan, L. Ruth (ed.), *Exploring Opportunities in Green Chemistry and Engineering Education – A Workshop to the Chemical Sciences Roundtable*, The National Academy Press, Washington, 2007.

[2] D. L. Hjeresen, D. L. Schutt, J. M. Boese, “Green Chemistry and Education”, *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1543.

[3] B. Braun, R. Charney, A. Clarens, J. Farrugia, C. Kichens, C. Lisowski, D.

Naistat, A. O’Neil, “Green Chemistry in the Curriculum”, *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1126-1129.

[4] M. C. Cann, T. A. Dickneider, “Infusing the Chemistry Curriculum with Green Chemistry Using Real-World Examples, Web Modules, and Atom Economy in Organic Chemistry Courses”, *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 977-980.

[5] T. J. Collins, “Introducing Green Chemistry in Teaching and Research”, *J. Chem. Ed.* **72** (1995) 965-966.

[6] D. A. Costa, M. G. T. C. Ribeiro, A. A. S. C. Machado, “Uma Revisão da Bibliografia sobre o Ensino da Química Verde”, *Química - Bol. S. P. Q.* **109** (2008) 47-51.

[7] A. A. S. C. Machado, “Métricas da Química Verde – A Produtividade Atómica”, *Química - Bol. S. P. Q.* **107** (2007) 47-55.

[8] DGIDC Web: http://sitio.dgdc.min-edu.pt/secundario/paginas/programas_es_f.asp (Direcção Geral de Inovação e Desenvolvimento Curricular, acedido em 13-12-2009)

[9] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa, A. A. S. C. Machado, “Uma Métrica Gráfica para Avaliação Holística da Verdura de Reacções Laboratoriais – “Estrela Verde””, *Química Nova*, aceite para publicação.

[10] M. G. T. C. Ribeiro, D. A. Costa, A. A. S. C. Machado, ““Green Star”: a Holistic Green Chemistry Metric for Evaluation of Teaching Laboratory Experiments”, *GC Letters & Reviews*, aceite para publicação.

[11] P. T. Anastas, J. C. Warner; *Green Chemistry – Theory and Practice*, Oxford P., Oxford, 1998.

[12] A. A. S. C. Machado, “Química e Desenvolvimento Sustentável – QV, QUIVES, QUISUS”, *Química - Bol. S. P. Q.* **95** (2004) 59-67.

[13] Web: <http://www.sigmaaldrich.com/portugal.html> (Sigma-Aldrich, acedido em 13-12-2009)

[14] S. M. Wright, “Introducing Safety Topics Using a Student-Centered Approach”, *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1519-1520.

[15] Web: <http://www.djc.com/news/en/11135656.html> (Environmental Outlook 2002, acedido em 13-12-2009)

[16] Y. I. Gonzalez, “A Green Clean Curriculum to Instruct Homeschoolers on the Safe Handling of Chemicals”, *J. Chem. Health Saf.* **16** (2004) 12-17.

[17] D. Hoolem M. Sithambaresan, “Analytical Chemistry Labs with Kits and Cd-Based Instructions as Teaching Aids for Distance Learning”, *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 1308-1310.

OS PROGRESSOS CIENTÍFICOS DE 2009

Os editores da revista *Science* seleccionaram aquelas que consideram os progressos científicos mais importantes de 2009. Tal como se descreve no número de 18 de Dezembro, os eleitos foram:

Ardipithecus ramidus.

O ano das comemorações dos 200 anos do nascimento de Charles Darwin é marcado pela descoberta de mais um elo da evolução humana. Depois da última grande descoberta (Lucy, em 1974), “A descoberta de 2009” é a do esqueleto de Ardi (e de restos de pelo menos mais 35 elementos da sua espécie), na Etiópia, aquele que é hoje considerado o mais longínquo antepassado humano. Descoberto em 1994, um equipa demorou 15 anos para concluir a sua escavação e analisar os seus ossos. Ardi foi apresentado, em 2009, como um novo tipo de homínido, a família que inclui os humanos e os nossos antepassados mas não os antepassados dos macacos. Com 3,2 milhões de anos, ela revela as alterações anatómicas que estiveram na base da deslocação vertical. Embora nem todos os paleontologistas estejam convencidos que *Ar. Ramidus* foi nossa antepassada ou mesmo um homínido, a sua descoberta parece estabelecer um novo marco de referência. A sua relação com Lucy e onde se encaixa na evolução humana irão manter muitos cientistas ocupados nos próximos tempos.

Captando os raios gama do céu.

As descobertas em Astronomia são baseadas na detecção e análise de radiação nas várias gamas do espectro electromagnético. Um dos corpos celestes mais intrigantes são os pulsares: estrelas de neutrões que, rodando sobre si próprias, emitem radiação pulsada. O primeiro pulsar foi descoberto há quatro décadas e, desde então, foram descobertos mais algumas centenas a partir da radiação rádio pulsada que emitem. O período dos seus pulsos de radiação varia de 1,4 milisegundos a 8,5 segundos.

Agora foi aberto um novo canal de descoberta – os raios gama, que permitem a descoberta de pulsares não detectados por observação da radiação rádio. As observações na região dos raios gama estão a melhorar a compreensão de como os pulsares funcionam, podendo ainda ajudar na detecção de ondas gravitacionais. Estas novas descobertas resultam da utilização do novo telescópio espacial (*Fermi Gamma-ray Space Telescope*) que tem estado a fazer um mapa das radiações gama do Universo desde que foi lançado em Junho de 2008.

Receptores ABA.

As plantas possuem o equivalente à adrenalina: um químico chamado ácido abscísico (*abscisic acid, ABA*). Altas concentrações de ABA mantêm as sementes dormentes e ajudam a impedir a perda de água e a inibir o crescimento das raízes e vegetativo em tempos difíceis. Após experiências sem sucesso para detectar os receptores desta hormona, em Maio de 2009, dois grupos independentes (um na Alemanha e outro nos Estados Unidos) identificaram a mesma família de proteínas como receptores. Estudos posteriores efectuados por grupos de outros países vieram confirmar esta descoberta que constitui uma dádiva para a biologia das plantas.

Identificação de monopólos magnéticos.

É conhecido que os ímanes têm dois pólos (norte e sul). Contudo, os físicos teóricos têm especulado sobre partículas fundamentais que têm apenas uns destes pólos. Em 1931, Paul Dirac argumentava que a existência de tais monopólos, previstos hoje pelas grandes teorias unificadoras das forças, explicaria a quantificação da carga eléctrica. Em Setembro de 2009 foi reportada a existência de monopólos em titanatos de hólmio e em titanatos de disprósio, o que promete constituir um campo fértil para teóricos e experimentalistas.

Longa vida e prosperidade.

Os cientistas mostraram, em 2009,

que a rapamicina provoca um aumento da longevidade de ratos, embora o mecanismo de actuação não esteja ainda esclarecido. Esta foi a primeira demonstração do aumento de longevidade num mamífero através do uso de um fármaco. A rapamicina é um fármaco usado para combater o cancro dos rins e a rejeição de órgãos transplantados. Contudo, este fármaco provoca uma debilitação do sistema imunitário, pelo que dificilmente se tornará um fármaco prático para prolongar a vida.

Revelação de uma Lua gelada.

Foi provada a existência de gelo na Lua. Após algumas evidências, a prova conclusiva foi obtida promovendo um impacto numa cratera da Lua que se encontra permanentemente escura, denominada Cabeus, para expor vários litros de água. Um satélite de observação (LCROSS – *Lunar Crater Observation and Sensing Satellite*) enviou então assinaturas espectroscópicas claras de vapor de água, gelo e grupos hidroxilo. A informação recolhida, evidenciando também a presença de moléculas de monóxido de carbono, metano e metanol, que estavam retidas no gelo de água, permitiu concluir que a água existente na Lua provém de cometas e asteróides, que têm bombardeado a sua superfície. Podemos imaginar que esta água pode servir para os astronautas beberem ou crescerem alimentos ou ainda para a separarem em hidrogénio e oxigénio para obterem combustível...desde que seja ultrapassada a dificuldade resultante da necessidade de extrair o gelo a temperaturas que excedem o zero absoluto em apenas 40 graus!

O regresso da terapia genética.

A terapia de genes, permitindo a reparação de células com mau funcionamento através da reparação do seu ADN, oferece uma solução elegante para doenças causadas por um só gene defeituoso. Desde o início do primeiro estudo humano em 1990, esta área sofreu reveses vários como dificuldades técnicas e a morte de um

voluntário num teste. Este ano, contudo, a terapia genética sofreu um assinalável avanço, com vários investigadores a divulgarem o tratamento com sucesso de várias doenças. Espera-se, para breve, a publicação dos resultados clínicos para outras doenças, estando em curso mais ensaios.

O grafeno.

Desde que, em 2004, investigadores do Reino Unido descobriram uma forma simples de remover camadas com a espessura de um átomo a partir de um pedaço de grafite, os estudos fundamentais e sobre aplicações deste novo material têm aumentado significativamente. Os estudos fundamentais derivam sobretudo da forma como os electrões se deslocam nestas camadas monoatómicas, quase perfeitas. Vários estudos têm sido feitos para observação de fenómenos quânticos, como o efeito de Hall quântico fraccionário. Importante para possíveis aplicações foi a descoberta de como preparar filmes de grafeno com áreas macroscópicas (até um centímetro quadrado). Têm sido fabricados vários dispositivos, como transístores e fotodetectores rápidos.

Apesar de ainda estarmos na fase de fabrico e teste de dispositivos simples, este pode ser um material com futuro para o fabrico de dispositivos mais rápidos que os convencionais de silício.

O renascimento do Hubble.

Quando estava a atingir o limite do tempo de vida útil, o telescópio espacial Hubble está a captar as melhores imagens da sua carreira de 19 anos. Graças à sua renovação, numa missão espacial realizada em Maio, o seu tempo de vida foi expandido por mais 5 anos. A tripulação do Atlantis efectuou uma missão de 11 dias em que, em 5 cinco saídas para o espaço, realizou um conjunto de operações ariscadas que permitiram que o Hubble retomasse a sua actividade, com alguns equipamentos melhorados.

O primeiro laser de raios-X.

Em Abril de 2009, cientistas americanos (do *SLAC National Laboratory* em *Menlo Park*, na Califórnia) ligaram o primeiro laser de raios-X do mundo. Com 130 metros de comprimento, este laser (designado por *Linac Coherent Light Source*, *LCLS*) é alimentado por um acelerador de partículas de 3 quilómetros. Os raios-X têm sido usados para determinar a estrutura de materiais. O LCLS produz pulsos de raios-X suficientemente curtos para permitir observar o progresso de reacções químicas e os cientistas esperam poder usar este laser para determinar a estrutura de uma proteína a partir de uma única molécula.

O vírus do ano.

A nova *Influenza H1N1*. Desde há muitos anos que os cientistas têm vindo

a alertar que podemos ser atingidos a qualquer momento por uma nova pandemia da gripe, com resultados catastróficos, como os observados com a gripe Espanhola de 1918. Tem sido admitido que tal surto possa ter início na Ásia e o vírus H5N1 tem sido alvo de particular atenção. Todos os anos é lançada uma nova vacina da gripe que pretende responder aos vírus ou mutações que surgem primeiro na Ásia, usando este lapso de tempo para o seu desenvolvimento. Contudo a pandemia despoletada na Primavera de 2009 não é a antecipada: teve início na América do Norte e o vírus (da gripe suína) é uma nova forma do vírus H1N1 que já circulava em humanos. E embora o novo H1N1 seja inesperadamente perigoso para jovens e grávidas, para a maioria das pessoas saudáveis não parece ser mais perigoso do que a gripe usual. Embora possa sofrer mutações para uma forma mais perigosa, para já figura na história por ter causado mais confusão que catástrofe. Contudo, a situação criada permitirá certamente melhorar a nossa capacidade de resposta, caso/ou quando formos atingidos por uma forma mais virulenta de gripe.

Jorge Morgado

CONFERÊNCIA

ICPIC 2010 - 13TH INTERNACIONAL CONGRESS ON POLYMERS IN CONCRETE

Entre 10 a 13 de Fevereiro de 2010 terá lugar na Ilha da Madeira a Conferência Internacional "ICPIC 2010 - 13th Internacional Congress on Polymers in Concrete", que é organizada pelo Departamento de Engenharia Civil da Universidade do Minho e pela *Internacional Community on Polymers in Concrete* (ICPIC).

Esta Conferência Internacional conta com o apoio institucional da *International Union of Laboratories and Experts in Constructions Materials, Systems and Structures* (RILEM), do *American*

Concrete Institute (ACI) e do *Japan Concrete Institute* (JCI) entre outros. Este evento, trará à Ilha da Madeira mais de uma centena de investigadores, técnicos, engenheiros e especialistas os quais discutirão e partilharão experiências no domínio dos betões com polímeros.

Estes materiais caracterizam-se por apresentarem uma maior durabilidade do que os betões correntes, sendo que durante a referida Conferência serão analisados as seguintes temáticas: Betões com Polímeros; Interface Polímero-Betão; Revestimentos e Injecções de fissuras; Reabilitação de betões.

A Conferência será composta várias palestras proferidas por especialistas de betões com polímeros, sendo que entre as mesmas terá lugar a apresentação de comunicações aprovadas pela Comissão Científica. Todas as informações pertinentes relacionadas com a Conferência Internacional poderão ser visualizadas no *site*: <http://www.icpic-community.org/icpic2010/>.



2PYChem
2nd Portuguese Young Chemists Meeting

Universidade de Aveiro
21 - 23 April 2010

2pychem@spq.pt





2ND PORTUGUESE YOUNG CHEMISTS MEETING – 2PYCHEM

21-23 ABRIL 2010 EM AVEIRO

O Grupo de Químicos Jovens da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), organiza o *2nd Portuguese Young Chemists Meeting* (2PYChem) que irá decorrer em Aveiro, durante os dias 21, 22 e 23 de Abril de 2010.

O programa conta em especial com a participação de jovens investigadores (a realizar trabalhos de mestrado, doutoramento e pós-doutoramento em Portugal ou no estrangeiro) que pretendam apresentar os resultados mais recentes dos seus estudos. Adicionalmente, o Encontro contará com um excelente painel de quatro palestrantes convidados: Kurt Wüthrich, ETH Zürich e Scripps Research Institute USA (Nobel da Química em 2002); Carlos Pascoal Neto, Universidade de Aveiro; José Moura, Universidade Nova de Lisboa e Manuela Carrott, Universidade de Évora. Este Encontro será assim uma oportunidade incontornável para promover a discussão científica e a colaboração entre os jovens investigadores portugueses, num ambiente agradável e estimulante.

Pela primeira vez, irá ser atribuído pela SPQ o Prémio Químicos Jovens. Este prémio visa promover a excelência da Química desenvolvida por Jovens Investigadores, com especial ênfase no impacto desta Ciência na Sociedade. O prémio terá frequência pelo menos bianual, podendo ser anual, e destina-se a recém-doutorados com menos de 35 anos e é atribuído com base no trabalho desenvolvido durante o Doutoramento, mas colocado esse trabalho num contexto de divulgação científica e na capacidade do Jovem Investigador para comunicar a relevância do seu trabalho. A divulgação dos resultados da primeira edição terá lugar em 2010 no 2PYChem.

E: 2pychem@spq.pt URL: www.spq.pt/gqj/2pychem



14TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON RESEARCH IN COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOLOGY -RECOMB 2010

25-28 ABRIL 2010 EM LISBOA

RECOMB 2010 é a decima quarta conferência numa série de conferências científicas que combinam as áreas das ciências computacionais, da matemática e da biologia, promovendo a apresentação de lições plenárias por cientistas de renome nas ciências da vida e apresentações de trabalhos seleccionados sobre biologia computacional.

A série de conferências RECOMB pretende atrair contribuições em todas as áreas da biologia molecular computacional, incluindo (i) análise de sequências moleculares, (ii) reconhecimento de genes e elementos reguladores, (iii) evolução molecular, (iv) estrutura de proteínas, (v) genómica estrutural, (vi) análise da expressão de genes, (vii) redes biológicas, (viii) tecnologias de sequenciamento e de genotipagem, (ix) desenvolvimento de fármacos, (x) algoritmos probabilísticos e computacionais, (xi) biologia de sistemas, (xii) proteómica computacional, (xiii) genómica estrutural e funcional e (xiv) sistemas de informação para biologia computacional e imagem.

As origens da conferência assentam na componente matemática e computacional da biologia, daí uma forte ênfase nos avanços computacionais no programa do evento. No entanto, as aplicações efectivas de técnicas computacionais para alcançar inovações biológicas permanecem um aspecto central da conferência.

E: recomb2010@kdbio.inesc-id.pt URL: kdbio.inesc-id.pt/recomb2010



Reunión del Grupo Español del Carbón Girona 2010

X REUNIÓN DEL GRUPO ESPAÑOL DEL CARBÓN – GEC X

9-12 MAIO 2010 EM GIRONA, ESPANHA

A X Reunião do Grupo Español del Carbón (GEC X) irá realizar-se em Girona, entre 9 e 12 de Maio de 2010. Estas reuniões, de carácter bianual, constituem um fórum aberto de debate, no qual se favorece o intercâmbio de informação científica e a interacção entre todos os agentes da Investigação, Desenvolvimento e Inovação, nas áreas de actividade que lhes são próprias: Energia, Materiais e Ambiente. O programa da GEC X está estruturado nos seguintes temas: (i) preparação e caracterização de materiais de carbono, (ii) carvões activados, (iii) catálise e reactividade, (iv) aplicações ambientais, (v) captura de CO₂, (vi) produção de hidrogénio, (vii) processos de conversão do carvão, (viii) aplicações energéticas e (ix) novas formas de carbono. Para mais informações, consultar a respectiva página *web*.

E: GECX@lequia.udg.edu URL: www.udg.edu/xrgec



EUROPEAN CONFERENCE ON X-RAY SPECTROMETRY – EXRS 2010

20-25 JUNHO 2010 NA FIGUEIRA DA FOZ

EXRS2010

A Conferência Europeia de Espectrometria de Raios-X (EXRS 2010) surge na série de conferências bianuais que começaram em Gotemburgo (1984 e 1986) e que foram continuadas em Viena, Antuérpia, Mykonos, Budapeste, Lisboa, Cracóvia, Berlim, Alguero, Paris e Dubrovnik. Estas conferências têm como objectivo a troca de ideias sobre técnicas emergentes e inovadoras de espectrometria de raios-X e áreas relacionadas e sobre as suas principais aplicações.

Procurando manter os moldes das edições anteriores, os principais tópicos do programa da edição de 2010 serão os seguintes: (i) interacções dos raios-X com a matéria e parâmetros fundamentais; (ii) fontes, ópticas e detectores de raios-X; (iii) metodologias de quantificação; (iv) TXRF, GIXRF e técnicas relacionadas; (v) técnicas de microfeixe; (vi) XRF móvel e portátil; (vii) WDXRS; (viii) sincrotrão XRS; (ix) PIXE e XRS induzida electronicamente; (x) desenvolvimentos científicos recentes por fabricantes de instrumentação XRS; (xi) imagiologia e tomografia de raios-X; (xii) espectroscopia de absorção e emissão de raios-X de alta resolução e (xiii) aplicações de XRS. O programa está organizado em lições convidadas, apresentações orais, contribuições em poster e inclui ainda uma exibição industrial.

E: exrs2010@fis.uc.pt URL: exrs2010.fis.uc.pt

3RD EUChEMS CHEMISTRY CONGRESS

29 AGOSTO-2 SETEMBRO 2010 EM NUREMBERGA, ALEMANHA



O 3º Congresso de Química da EuChEMS, a realizar em Nuremberga entre 29 de Agosto e 2 de Setembro de 2010 é organizado sob os auspícios da EuChEMS, Associação Europeia para as Ciências Químicas e Moleculares, que congrega 50 sociedades, incluindo a Sociedade Portuguesa de Química, representando um total de 150000 químicos. A Sociedade Alemã de Química é a sociedade acolhedora deste Congresso. À semelhança do sucesso das edições anteriores do Congresso, que se realizaram em Budapeste (2006) e em Torino (2008), a edição de 2010 irá permitir reunir cientistas da indústria, de instituições académicas e governamentais de toda a Europa e do mundo para discutir a investigação mais recente nas áreas nucleares da química e analisar o impacto da química na sociedade.

Será dada ênfase particular aos grandes desafios globais e às contribuições importantes que as ciências químicas fornecem para responder a esses desafios. O programa científico encontra-se organizado em sete tópicos principais, cada um compreendendo vários simpósios, e inclui não só lições plenárias e convidadas, mas também comunicações orais e sessões de posters. Está previsto ainda um espaço de exibição onde empresas de topo irão divulgar as suas inovações mais recentes na área da química e campos associados.

E: euchems-congress2010@gdch.de URL: www.euchems-congress2010.org



XXII CONGRESO IBERO-AMERICANO DE CATÁLISE
5-10 SETEMBRO 2010 EM CÓN-CÓN, CHILE

A Federação Ibero-americana de Sociedades de Catálise (FISCOCat) em conjunto com a Divisão de Catálise e Adsorção da Sociedade Chilena de Química organizam o XXII Congresso Ibero-americano de Catálise, entre 5 e 10 de Setembro de 2010 em Cón-Cón, Chile.

Os Simpósios organizados anteriormente pela FISCOCat constituíram um importante fórum de intercâmbio de experiências e conhecimento pessoal para os membros de Sociedades Ibero-americanas de Catálise, como o demonstra o crescente número de participantes que se observou nas últimas reuniões.

O programa científico encontra-se estruturado nas seguintes áreas temáticas: (i) catálise na produção de combustíveis e de energia; (ii) catálise ambiental; (iii) catálise em química fina e industrial; (iv) inovação e desenvolvimento de catalisadores; (v) superfície e reactividade; (vi) processos avançados de oxidação; (vii) catálise homogénea; (viii) biocatálise e (ix) engenharia de processos catalíticos. Para mais informações consultar a respectiva página *web*.

E: cicat2010@udec.cl URL: www.cicat2010.cl

FOURTH EUROPEAN WORKSHOP ON OPTICAL FIBRE SENSORS - EWOFs'2010
8-10 SETEMBRO 2010 NO PORTO

Após o sucesso das edições anteriores em Peebles (1998), Santander (2004) e Nápoles, a quarta edição do Workshop Europeu de Sensores de Fibra Óptica – EWOFs'2010 irá realizar-se no Porto, entre 8 e 10 de Setembro de 2010. Estes eventos têm como objectivo promover um encontro científico com elevado nível de interacção entre os participantes, permitindo um debate amplo e a avaliação de novos conceitos, tecnologias e aplicações no domínio dos sensores de fibra óptica, como também o estabelecimento de novas colaborações e redes de trabalho. O programa científico do *Workshop* compreende um leque muito alargado de tópicos, entre os quais se destaca a aplicação de sensores de fibra óptica na química, no ambiente, na biologia e na medicina. Para informações completas sobre o evento, consultar a respectiva página *web*.



E: ewofs@inescporto.pt URL: www.ewofs.org

Secção compilada por Helder Gomes

Setembro 2009-Junho 2010 em Oeiras

2º Ciclo de Seminários Antonio V. Xavier – ITQB
URL: www.spq.pt/docs/AVX_Seminars_2009_2010.pdf

23-25 Março 2010 em Granada, Espanha

International Conference on Renewable Energies and Power Quality - ICREPQ'10
E: icrepq@icrepq.com
URL: www.icrepq.com

29-31 Março 2010 em Vilamoura

IFAC Conference on Control Methodologies and Technology for Energy Efficiency
E: info@cmtee.org
URL: www.cmtee.org

21-23 Abril 2010 em Aveiro

2nd Portuguese Young Chemists Meeting – 2PYChem
E: 2pychem@spq.pt
URL: www.spq.pt/gqj/2pychem

25-28 Abril 2010 em Lisboa

14th International Conference on Research in Computational Molecular Biology -RECOMB 2010
E: recomb2010@kdbio.inesc-id.pt
URL: kdbio.inesc-id.pt/recomb2010

9-12 Maio 2010 em Girona, Espanha

X Reunión del Grupo Español del Carbón – GEC X
E: GECX@lequia.udg.edu
URL: www.udg.edu/xrgec

6-11 Junho 2010 em Carvoeiro

8th International Symposium on Electrochemical Impedance Spectroscopy - EIS 2010
E: eis2010@eis2010.org
URL: www.eis2010.org

14-17 Junho 2010 em Lisboa

Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics - ECCOMAS CFD 2010
E: info@eccomas-cfd2010.org
URL: www.eccomas-cfd2010.org

20-25 Junho 2010 na Figueira da Foz

European Conference on X-Ray Spectrometry – EXRS 2010
E: exrs2010@fis.uc.pt
URL: exrs2010.fis.uc.pt

24-26 Junho 2010 em Bragança

FOODSIM'2010
E: cimo@ipb.pt

28 Junho-2 Julho 2010 em Bolonha, Itália

EUICHEM Conference on Organic Free Radicals
E: chrys@isof.cnr.it
URL: www.isof.cnr.it/biofreeradicals/Euchem.html

11-16 Julho 2010 em Ferrara, Itália

XXIII IUPAC Symposium on Photochemistry
E: snf@unife.it
URL: www.unife.it/iupac-photochem-2010

11-16 Julho 2010 em Glasgow, Escócia

43rd International Symposium on Macromolecules - IUPAC World Polymer Congress 2010
E: pete.lovell@manchester.ac.uk
URL: www.Macro2010/org

25-30 Julho 2010 em Leoben, Áustria

14th International Symposium on Solubility Phenomena & Related Equilibrium Phenomena
E: heinz.gamsjaeger@mu-leoben.at
URL: issp.unileoben.ac.at

1-6 Agosto 2010 em Bergen, Noruega

18th International Conference on Organic Synthesis
E: leiv.sydnes@kj.uib.no
URL: www.icos-18.no

15-19 Agosto 2010 em Ottawa, Canadá

3rd IUPAC Conference on Green Chemistry
E: jessop@chem.queensu.ca
URL: www.icgc2010.ca

29 Agosto-2 Setembro 2010 em Nuremberga, Alemanha

3rd EuCheMS Chemistry Congress
E: euchems-congress2010@gdch.de
URL: www.euchems-congress2010.org

29 Agosto-2 Setembro 2010 em Praga, República Checa

19th International Congress of Chemical and Process Engineering - CHISA 2010
7th European Congress of Chemical Engineering - ECCE-7
E: org@chisa.cz
URL: www.chisa.cz/2010

5-10 Setembro 2010 em Cón-Cón, Chile

XXII Congreso Iberoamericano de Catalise
E: cicat2010@udec.cl
URL: www.cicat2010.cl

8-10 Setembro 2010 em Lisboa

XXXV Reunião Ibérica de Adsorção - RIA
E: ria-lisboa@fc.ul.pt
URL: ria2010.fc.ul.pt

8-10 Setembro 2010 no Porto

Fourth European Workshop on Optical Fibre Sensors - EWOFs'2010
E: ewofs@inescporto.pt
URL: www.ewofs.org

12-15 Outubro 2010 em Lisboa

XXI Encontro Nacional Tecnicelpa
VI Congresso Iberoamericano de Investigação em Celulose e Papel - CIADICYP 2010
E: tecniceipa.ciadicyp@tecniceipa.com
URL: tecniceipa.com/ciadicyp/2010

15-17 Dezembro 2010 no Porto

Congresso Nacional de Bioquímica
E: spb@imagem.ibili.uc.pt
URL: www.spb.pt

Secção compilada por Helder Gomes