

## EDITORIAL

## NOTICIÁRIO SPQ

Resultados das Semifinais das Olimpíadas de Química* 2012	3
Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química* 2012	4
Apurados os Finalistas da Edição de 2012 das Olimpíadas de Química Júnior (OQJ)	5
3 <sup>rd</sup> Portuguese Young Chemists Meeting – 3PYCheM	10
International Workshop on Ionic Liquids (WILS 2012)	10
International Conference on Solid Compounds of Transition Elements (SCTE2012)	12
Prémio PYCA – Gradiva 2012	14
ChemRus – Química Online: Vencedores da Edição 2012	14
Divisão de Química Alimentar – Divulgação de Notícias da FCD-EuCheMS	15
O Futuro da SPQ – Os Químicos Jovens Portugueses	16
A Calorimetria não é Daltónica...	16

## ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA E CENTENÁRIO DA SPQ

Comemorações do Centenário da SPQ – Sessão na Politécnica	17
Um Ano de Química, o Ano Internacional da Química	18
Apresentação da Tradução Portuguesa do <i>Traité Élémentaire de Chimie</i> de Lavoisier	21
Reunião Anual do ChemPubSoc Europe, Lisboa, 20-21 de Abril	25
Uma Molécula Chamada SPQ	26

## NOTICIÁRIO ESCOLAS

Projetos Editoriais de Química para 2012/2013	27
---	----

## LIVROS E MULTIMÉDIA

Manual de Trabalhos Laboratoriais de Química Orgânica e Farmacêutica <i>M. Matilde Marques</i>	29
Camões e a Química. A Química em Camões <i>José Artur Martinho Simões</i>	30
Quase Poesia Quase Química <i>João C. Paiva</i>	31

## ARTIGOS PYCA 2012

Pequenas Moléculas Sulfatadas: ao Serviço do Coração <i>Marta Correia da Silva</i>	35
Como as Moléculas Sublimam... <i>Carlos Lima</i>	39
Chuva de Químicos? <i>Patrícia S. M. Santos</i>	43

## ARTIGOS

100 Anos da Química em Portugal sob os Auspícios da SPQ Parte III. Indicadores de Modernidade na Química do Século XX <i>Sebastião J. Formosinho</i>	47
O Verde que não era Esperança <i>João Paulo André</i>	55
Avanços na Síntese Química: Síntese Assistida por Micro-Ondas <i>Ana M. G. Silva, Vera L. M. Silva, Carla Queirós, Joana Pinto</i>	61
Indicadores Biológicos de Exposição (IBE) a Agentes Químicos <i>J. P. Sousa, M. L. Pereira</i>	69

## QUÍMICA E ENSINO

“Química por Tabela 2.0” Espetáculo para Comunicar Ciência <i>Regina M. S. Sousa, Paulo Ribeiro Claro, Brian J. Goodfellow</i>	73
--	----

## ATIVIDADES COM OS PAIS NO COMPUTADOR

Acerto de Equações Químicas <i>Emanuel Alexandre Coutinho de Freitas Reis, João Carlos Matos Paiva</i>	79
---	----

## QUÍMICA PARA OS MAIS NOVOS

<i>Marta C. Corvo</i>	85
-----------------------	----

## DESTAQUES

## AGENDA

## Centenário SPQ

21

No âmbito das comemorações do Centenário da SPQ, é publicada uma tradução portuguesa do Tratado Elementar de Química, de Lavoisier.

ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

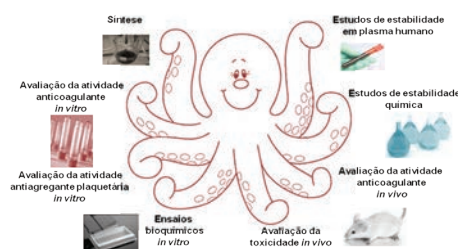


Nesta Edição

## Artigo PYCA 2012

35

Trabalho vencedor da edição de 2012 do Prémio Químicos Jovens, uma contribuição para o desenvolvimento de novos agentes antitrombóticos.



## Artigo

55

O arsénio foi um elemento químico que marcou a sociedade vitoriana, em particular o arsenito de cobre, conhecido como “verde de Scheele”.





Helder Gomes  
bquimica@ipb.pt  
www.spq.pt

No primeiro semestre deste ano temos observado com alguma preocupação o aumento progressivo da taxa de desemprego no nosso país, tendo atingido no final do mês de março o valor record de 15,3%, segundo dados do Eurostat, incidindo sobretudo sobre os mais jovens. A taxa de desemprego em Portugal é já a terceira mais alta da União Europeia, sendo as consequências desta realidade bem visíveis no dia-a-dia de todos nós. De um modo direto ou indireto, todos conhecemos ou ouvimos relatos de casos de famílias com dificuldades económicas graves, agregados com elementos em idade escolar e com ambos os pais no desemprego, alunos carenciados que chegam à escola mal nutridos, para referir alguns. No ensino superior, com os alunos deslocados, com propinas para pagar, proliferam em particular os relatos sobre dificuldades económicas para manter os filhos a estudar, os atrasos no pagamento de propinas e os atrasos e a falta de equidade na atribuição de bolsas e de residências, nem sempre correlacionáveis com a riqueza aparente dos alunos que as auferem. Todas estas situações resultam em abandono escolar ou na necessidade de trabalhar para estudar, por vezes em horários noturnos com a consequente fadiga e redução da capacidade de aprendizagem, com custos indiretos brutais para o país. Urge inverter esta situação! Citando o Ministro Adjunto e dos Assuntos Parlamentares “O desemprego tira-nos o sono ... mas deverá baixar em 2014”, na teoria económica, é válida esta afirmação, numa primeira fase a austeridade leva à redução do produto interno bruto de um país e do emprego, que recuperará numa fase posterior, mas a preocupação reside no tempo do ajustamento, o país precisa de sentir a inversão mais cedo e precisa por isso de iniciar políticas de crescimento e emprego, sob pena de entrar em colapso social.

O problema do desemprego ameaça arrastar-se até ao jovens investigadores recém-doutorados, recursos humanos altamente qualificados, essenciais para o desenvolvimento de uma economia moderna e baseada na inovação. Infelizmente, alguns jovens excecionais são obrigados a emigrar para outros países, não concretizando assim o retorno do investimento realizado pelo país. Exemplos de jovens excecionais na área da Química são os galardoados com o Prémio Jovens Investigadores (PYCA - Portuguese Young Chemists Award), atribuído pelo Grupo de Químicos Jovens da SPQ. Realizou-se este ano a segunda edição do PYCA, cujo objetivo consiste premiar recém-doutorados com idades até 35 anos que revelem capacidade em comunicar a relevância do trabalho desenvolvido durante o seu doutoramento, num contexto de divulgação científica. O Prémio principal foi atribuído este ano à Doutora Marta Silva, da Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto e, dada a qualidade dos trabalhos apresentados, foram ainda atribuídas duas Menções Honrosas, a Carlos Lima, da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, e a Patrícia Santos, da Universidade de Aveiro. A todos eles parabéns e felicidades para a sua carreira futura. Aos premiados é possibilitada a publicação no QUÍMICA dos seus artigos avaliados no concurso, poderá encontrá-los no interior deste fascículo.

Como vendo sendo noticiado, as Comemorações do Centenário da fundação da Sociedade Portuguesa de Química decorrem durante todo o ano de 2012. A sessão oficial de abertura das comemorações foi realizada no passado dia 9 de fevereiro com uma Assembleia Geral Extraordinária da SPQ no **Amphiteatro de Chimica da Escola Polytechnica** (Museu de Ciência, R. da Escola Politécnica, Lisboa), o mesmo local onde, precisamente no dia 27 de dezembro de 1911, foi realizada a primeira reunião da SPQ. Dada a importância do evento realizado no dia 9 de fevereiro, registamos neste e no próximo número do QUÍMICA, para posteridade, todas as comunicações constantes da ordem de trabalhos. E porque estamos em pleno período de comemorações, vem a propósito uma curiosidade, sabia que existe uma molécula chamada SPQ? A Sociedade Portuguesa de Química descobriu-a recentemente, convidamo-lo também a descobri-la no interior deste fascículo do QUÍMICA. Existem por certo muitas outras moléculas que talvez conheça, com nomes comuns curiosos, ou com histórias e propriedades interessantes, que queira partilhar. Lançamos aqui o desafio para nos dizerem qual é a molécula que vos diz mais, quer porque trabalham muito com ela, quer por que a acham interessante devido a alguma propriedade, quer porque a sintetizaram, quer pelas aplicações que tem, etc. Os trabalhos recebidos serão publicados numa nova secção intitulada “A Minha Molécula Favorita”. Ficamos a aguardar as vossas contribuições.

Boa leitura!

## BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Textos Segundo o Novo Acordo Ortográfico

**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 125, abril – junho 2012

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

**Editor**  
Helder Gomes

**Editores-Adjuntos**  
Carlos Baleizão  
Carlos Folhadela  
Joana Amaral  
João Paiva

**Comissão Editorial**  
Jorge Morgado  
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

**Design Gráfico e Paginação**  
Paula Martins

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

**Tiragem**  
1655 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 Direção 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 no fascículo janeiro-março de cada ano e no sítio web da SPQ.

Publicação subsidiada pela

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

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

RESULTADOS DAS SEMIFINAIS DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA<sup>+</sup> 2012

Nas disputadas provas que decorreram em Aveiro, Porto e Lisboa, no passado dia 3 de março, foram apurados os finalistas que competiram na fase final das Olimpíadas de Química<sup>+</sup> 2012, na qual foi selecionado o grupo restrito de vencedores que representarão Portugal nas provas internacionais do próximo ano.

Uma vez mais, a acolher de forma entusiástica os participantes estiveram as equipas coordenadas pela Prof. Diana Pinto (Semifinal de Aveiro), Prof. Jorge Gonçalves (Semifinal do Porto) e Prof. Jorge Morgado (Semifinal de Lisboa).

Segue-se a descrição de cada uma das semifinais.

**SEMIFINAL DE AVEIRO (DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, UNIVERSIDADE DE AVEIRO)**

Em Aveiro, as provas decorreram com grande sucesso, e nem a chuva que se fez sentir nesse dia causou problemas! A organização preparou uma atividade para os professores acompanhantes (Recursos pedagógicos para uma sociedade de consumo esclarecida – Projeto Dolceta, Grupo de Disseminação Dolceta Portugal, a cargo de José M.G. Pereira, Maria Clara Magalhães e Solange Burri), bem como um espetáculo final para todos, designado “Química em Espetáculo!!!”. Quanto aos resultados das provas, estes revelaram-se bastante positivos e muito renhidos, sendo necessário avaliar o desempenho das equipas ao detalhe para determinar a sua seriação.

**LISTA DOS VENCEDORES DA SEMIFINAL DE AVEIRO****Medalhas de Ouro**

Escola Secundária Infanta D. Maria - Coimbra

Prof. Responsáveis: Celeste Queija e Laura Nunes

Joana Inês Oliveira

João Luís Sousa Janela

Maria Carolina Amoedo Gonçalves

**Medalhas de Prata**

ES com 3.º Ciclo do Ensino Básico Soares Basto - Oliveira de Azeméis

Prof. Responsáveis: Paula Cristina Ornelas e Ana Maria Santos

João Paulo Martins Rosa

Mariana Mendes Martins Coelho

Micael Marques Mendes

**Medalhas de Bronze**

ES com 3.º Ciclo do Ensino Básico Dr. Mário Sacramento - Aveiro

Prof. Responsáveis: Cecília Veiga e José Manuel Nunes

Bruno Miguel Miguez Barroso

Juliana Couras Fernandes Silva

Manuel Tomás Farinha Carço

**Diana Pinto**

Coordenadora da Semifinal de Aveiro

**SEMIFINAL DO PORTO (DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, FACULDADE DE CIÊNCIAS, UNIVERSIDADE DO PORTO)**

No passado dia 3 março teve lugar mais uma edição da semifinal Norte das Olimpíadas de Química<sup>+</sup>, no Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Apresentaram-se a este evento 42 das 50 escolas inicialmente inscritas na plataforma web da SPQ. Para além da realização da prova, os estudantes e os professores acompanhantes tiveram a oportunidade de participar em várias atividades especialmente programadas para este dia. Esta edição contou com o apoio da Universidade do Porto, da Porto Editora e da Texto Editora, que gentilmente contribuíram com ofertas para os estudantes participantes, e da Casa das Ciências, que promoveu uma palestra de divulgação para os professores acompanhantes. Apurados os resultados, foram divulgadas as três equipas melhor classificadas.

**LISTA DOS VENCEDORES DA SEMIFINAL DO PORTO****Medalhas de Ouro**

Externato Cedros

Prof. Responsável: Nuno Francisco

Álvaro Samagaio

Emanuel Matias

João Francisco Souto

**Medalhas de Prata**

ES/3B Emídio Garcia - Bragança

Prof. Responsável: Luísa Fernandes

Ana Margarida Gomes

Filipe Mota

Joana Piloto

**Medalhas de Bronze**

Colégio Luso-Francês

Prof. Responsável: Sónia Marília Castro

João Daniel Moreira

Luís Daniel Alves

Maria Francisca Cunha

**Jorge Gonçalves**

Coordenador da Semifinal do Porto

**SEMIFINAL DE LISBOA (INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO, UNIVERSIDADE TÉCNICA DE LISBOA)**

As atividades iniciaram-se com a receção aos participantes, alunos e professores, pelas 10h30min na Torre de Química. Compareceram 37 escolas das 46 inicialmente previstas. As provas decorreram entre as 11h e o meio-dia. Enquanto os alunos estavam concentrados na resolução dos problemas e desafios da prova, os professores puderam apreciar a exposição da Prof<sup>a</sup> Clementina Teixeira, “Artesãos do Século XXI” (também acessível em <http://web.ist.utl.pt/~clementina/artesaos/>), e trocar com ela impressões sobre esse trabalho. Seguiu-se o almoço na cantina dos serviços sociais, oferecido pela Reitoria da Universidade Técnica de Lisboa.

A tarde iniciou-se com as sessões de divulgação “Luz sobre as moléculas”, apresentada pelo Prof. Mário Nuno Santos, Presidente da SPQ; e “Show de azoto”, pela Prof<sup>a</sup> Clementina Teixeira. Durante este período, vários professores do Departamento de Eng. Química



do IST, cuja colaboração se agradece, procederam à correção das provas. No final destas sessões, os participantes reuniram-se no Centro de Congressos do IST para a divulgação dos resultados das provas e entrega dos prémios pelo Prof. Mário Nuno Santos.

Foi então encerrada a sessão, tendo sido servido um lanche a todos os participantes de forma a recuperar energias para a viagem de regresso.

Aos vencedores desta semifinal desejamos o maior sucesso para a final.

#### LISTA DOS VENCEDORES DA SEMIFINAL DE LISBOA

##### Medalhas de Ouro

Escola Secundária de Aquilino Ribeiro - Porto Salvo

Prof. Responsável: Isabel Domingos Rebelo

Frederico Miguel Freire Neves  
Diogo Miguel Nunes da Silva  
Tiago Filipe Nunes da Silva

##### Medalhas de Prata

Escola Secundária Ferreira Dias - Cacém

Prof. Responsável: Ana Paula Almeida

António José Santos Abreu  
José Pedro Machado dos Santos  
Miguel Cardoso Monteiro

##### Medalhas de Bronze

Escola Secundária Dr. Jorge Augusto Correia - Tavira

Prof. Responsável: Rosa Maria Leal Moreira da Palma

Carlos Moura Teixeira

Andreia Viegas

Laura Labrador

**Jorge Morgado**

Coordenador da Semifinal de Lisboa



Prova teórica – Semifinal do Porto



Equipa vencedora (Externato Cedros) na semifinal do Porto



Fotografia da equipa vencedora da semifinal do IST - Lisboa (alunos e Profª) com o Presidente da SPQ, Prof. Mário Nuno Santos

## FASE REGIONAL DE BRAGANÇA DAS OLIMPÍADAS DE QUÍMICA+ 2012

Pelo sétimo ano consecutivo, a Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química+ realizou-se na Escola Superior de Tecnologia e Gestão do Instituto Politécnico de Bragança (IPB), no dia 31 de janeiro. A organização do evento coube, uma vez mais, ao Departamento de Tecnologia Química e Biológica em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Este ano, a prova laboratorial incidiu na determinação de sulfatos na água do rio Fervença recorrendo a um método espectrofotométrico.

Em 2012 as inscrições foram muitas, mas infelizmente o número de participantes esteve limitado à disponibilidade de recursos laboratoriais. Assim, as provas decorreram com um total de 84 alunos distribuídos por 28 equipas provenientes de 7 escolas do distrito, nomeadamente Colégio Torre Dona Chama, Escola ES/3 Abade de Baçal de Bragança, Escola EB2,3/S

D. Afonso III de Vinhais, Escola ES/3 Emídio Garcia de Bragança, Escola EB2,3/S de Macedo de Cavaleiros, Escola Secundária Miguel Torga de Bragança e Escola Secundária/3 de Mirandela. Após as provas, os alunos recuperaram forças com o almoço servido na cantina do IPB, seguindo-se a sessão de divulgação de resultados, onde todos os participantes receberam um certificado de participação. Uma vez mais, e mesmo em “tempos de crise económica”, este evento contou com o já habitual e indispensável patrocínio do Crédito Agrícola, o que permitiu atribuir um prémio monetário às equipas com melhor desempenho. Os alunos das 3 equipas melhor classificadas viram o seu empenho recompensado com a atribuição do prémio “Crédito Agrícola”, correspondendo à abertura de uma conta bancária no valor de 100€, 75€ e 50€, para cada um dos alunos das equipas que ficaram na 1.ª, 2.ª e 3.ª posições, respetivamente.

As equipas que arrebatarem as três primeiras posições foram as seguintes:

##### Medalhas de Ouro

Escola Secundária/3 de Mirandela

Prof. acompanhante: Marília Vinhais

Ana Isabel Monteiro, Pedro Emanuel Valentim e David Pires Martins

##### Medalhas de Prata

Escola ES/3 Emídio Garcia

Prof. acompanhante: Luísa Maria Fernandes

Joana Piloto, Filipe Mota e Ana Margarida Gomes

##### Medalhas de Bronze

Escola ES/3 Abade de Baçal

Prof. acompanhantes: Florinda Cesária Fernandes e Cristiana Morais

Berta Gomes Gonçalves, Khanda Utasunova e Maria Teresa Aguiar

As 3 escolas melhor classificadas foram premiadas com o financiamento



da sua participação na Semifinal do Porto das Olimpíadas de Química\*, financiamento este que inclui os gastos com a deslocação e alojamento das equipas. Novamente, tal só foi possível devido ao apoio monetário do Crédito Agrícola e ao apoio da Câmara Municipal de Bragança, que assegura o transporte das equipas à Semifinal que se realiza no Porto. Aos patrocinadores, um agradecimento pela aposta nas futuras gerações de químicos, e aos alunos, votos de sucesso e muito “entusiasmo químico”!

**Joana Amaral** (jamaral@ipb.pt)  
Coordenadora da Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química\*



Fotografias do ambiente vivido nas provas. Em cima, à esquerda, equipa classificada em 1.º lugar

## APURADOS OS FINALISTAS DA EDIÇÃO DE 2012 DAS OLIMPÍADAS DE QUÍMICA JÚNIOR (OQJ)

No passado dia 14 de abril realizaram-se, por diversas cidades do país, as semifinais das Olimpíadas de Química Júnior. Em cada semifinal foram premiadas as 3 melhores equipas com as medalhas de “Ouro”, “Prata” e “Bronze”, respetivamente. Seguem-se as reportagens de diferentes provas em que se descreve a experiência vivida pelos participantes. Um agradecimento especial a todos os envolvidos na organização das provas e que contribuíram para a realização de mais esta “festa da química”!

Os alunos apurados disputaram a Final Nacional que decorreu no dia 5 de maio de 2012.

### SEMIFINAL DAS OLIMPÍADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NA UNIVERSIDADE DO MINHO (BRAGA)

O Departamento de Química da Universidade do Minho organizou, pela oitava vez consecutiva, as *Olimpíadas de Química Júnior* em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Química. No passado dia 14 de abril de 2012 estiveram presentes no *Campus* de Gualtar, em Braga, 90 alunos provenientes de 30 escolas da região, organizados em 30 equipas, acompanhados por mais de 30 professores.

Após uma curta cerimónia de boas vindas a todos os participantes, as

provas tiveram início às 14h30min e decorreram nos laboratórios de ensino do Departamento de Química e no Anfiteatro da Escola de Ciências. Durante cerca de duas horas, as 30 equipas responderam a 24 questões na prova de laboratório, baseadas em situações e montagens experimentais, e a outras 29 questões na prova de anfiteatro, baseadas em situações apresentadas com recurso a meios audiovisuais.

Pelas 17h00 todos os participantes tiveram oportunidade de assistir a uma palestra intitulada “A Química é divertida e curiosa” apresentada pela Doutora Maria Manuela Silva. Foram sorteados alguns brindes pelos alunos participantes e professores

acompanhantes (T-shirts com a Tabela Periódica, réguas, canetas da UM e livros de Química, estes oferecidos pela SPQ).

A divulgação dos resultados, momento alto das OQJ, aconteceu por volta das 17h30min. A medalha de ouro foi atribuída à equipa constituída pelos alunos Ângela Neto, João Rocha e Maria Carlos Pereira, da Escola EB 2,3 Júlio Brandão, de Famalicão. A medalha de prata foi entregue à equipa constituída pelos alunos Daniela Basto, Joaquim Santos e Sara Dourado, da Escola EB 2,3 de Cabeceiras de Basto. A medalha de bronze foi para a equipa constituída pelos alunos Gonçalo Terroso, José Ferreira e Nuno Silva, da Escola EB 2,3 de Cal-



Comissão Organizadora e equipas vencedoras da semifinal das OQJ 2012 (U. Minho)

das das Taipas, de Guimarães. Para além das medalhas da SPQ, estes alunos foram presenteados pelo Departamento de Química da UM com T-shirts com a Tabela Periódica, caixas de modelos moleculares e “USB Flash Drives”, de valor variável consoante o lugar obtido.

Este evento contou com o patrocínio da SPQ, do Departamento de Química da Universidade do Minho, da Capital Europeia da Juventude e de algumas empresas. A cobertura das OQJ foi feita pelos órgãos de comunicação social da região.

**Maria Manuela Silva, Maria José Medeiros, Maria Gabriela Botelho, Maria Manuela Raposo, Susana Costa e Sílvia Lima**

Organização das OQJ 2012 na U. Minho

### SEMIFINAL DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NA UNIVERSIDADE DE COIMBRA

Decorreram no dia 14 de abril, no Departamento de Química (DQ) da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra (UC), mais umas Olimpíadas de Química Júnior, as 8.<sup>as</sup>, numa organização conjunta da SPQ e do DQ da UC.

Este ano contou com a participação de 38 escolas, tendo estado em prova cerca de 170 alunos do ensino básico (8.º e 9.º anos), maioritariamente dos distritos de Viseu, Leiria e Coimbra, mas também de Aveiro, Guarda e Santarém. Foi um dia em que estes alunos puderam, para além de efetuar diversas provas de química (8 atividades laboratoriais divididas em 3 laboratórios e uma componente teórica), conhecer a UC através da visita à exposição ‘Da cartografia do poder aos itinerários do saber’ (comemorativa do centenário da Faculdade de Ciências da UC), patente na Galeria



de Zoologia do Museu da Ciência, e de uma apresentação de um docente do DQ, o Dr. Paulo Abreu, que proferiu uma palestra (‘A química do outro lado do espelho’) sobre como a simetria está presente em todo o lado, nomeadamente na química do nosso dia-a-dia.

Em cada ano que passa vamos notando que os nossos olímpicos vêm cada vez mais bem preparados e assim a grande maioria das equipas teve resultados médios de 80%, sendo que a equipa vencedora ultrapassou os 90%. No fundo foram todos vencedores, mas para registo aqui ficam os três primeiros classificados. Em primeiro lugar ficou a equipa “Colecionadores de isótopos”, constituída pelos alunos Pedro António P. Azeitona, Francisco G. Contente e João André A.F.V. Gomes, orientada pelo professor Desidério Carreira Pires, da Escola Básica 2,3 Frei Estêvão Martins, de Alcobça. Um professor que já conseguiu quatro vitórias em anteriores edições!

O segundo lugar pertenceu à equipa “stephens\_alfa”, constituída pelos alunos Ana Aparício, Carolina Lopes e Tiago Silva, orientada pela professora Sandra Figueiredo, da Escola Básica dos 2.º e 3.º Ciclos de Guilherme Stephen, da Marinha Grande.

Finalmente, o terceiro lugar foi conquistado pela equipa “stephens\_beta”, constituída pelos alunos João Francisco, Manuel Simões e Mariana Vaz, orientados pela mesma professora e escola dos classificados em segundo lugar. A professora Sandra Figueiredo foi aliás a professora acompanhante dos primeiros vencedores das Olimpíadas de Química Júnior de Coimbra no já distante ano de 2005, na altura com uma equipa da escola de São Martinho do Porto. E com que confiança vinham estes concorrentes!...



Fotografias do ambiente vivenciado na semifinal de Coimbra

Em ambos os casos os professores acompanhantes ilustram o quanto é relevante e importante o papel de professor na formação dos nossos jovens e neste caso no gosto e formação em química.

No momento em que se escrevem estas linhas apenas posso desejar às duas primeiras equipas a melhor sorte na final nacional, que decorrerá no próximo dia 5 de maio em Lisboa no IST.

A organização das OQJ 2012 em Coimbra congratula-se com todos os participantes e agradece o patrocínio da Caixa Geral de Depósitos, da SPQ e da FCTUC, bem como o apoio da Porto Editora.

**J. Sérgio Seixas de Melo**

Organização das OQJ 2012 na U. Coimbra

### SEMIFINAL DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NA UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR (COVILHÃ)

Pelo oitavo ano consecutivo decorreu, no Departamento de Química da Universidade da Beira Interior (UBI), a semifinal regional das OQJ. Nesta edição participaram 87 alunos, integrados em 29 equipas, provenientes de 15 escolas dos distritos de Castelo Branco, Guarda, Portalegre e Viseu.

O evento contou, na sua sessão de abertura, com a presença da Presidente do Departamento de Química, do representante da UBIQuímica-Núcleo de Estudantes do Departamento de Química e da comissão organizadora, que deram as boas-vindas a todos os participantes.

Durante a manhã, as equipas participantes realizaram duas provas com questões de escolha múltipla, uma de carácter mais teórico, que teve lugar no anfiteatro Prof. Pinto Peixoto, e outra de carácter experimental, que decorreu nos laboratórios de Química. Durante este período, os professores acompanhantes puderam participar numa visita ao Núcleo da Real Fábrica Veiga/Centro de Interpretação dos Lanifícios, do Museu de Lanifícios da Universidade da Beira Interior. Seguiu-se o almoço dos participantes na Cantina de Sto. António da UBI.



A cerimónia de encerramento teve início às 15h30min, com a divulgação dos resultados e a entrega dos prémios, a qual foi efetuada pela Presidente da Faculdade de Ciências da UBI e pelo representante do Banco Santander Totta. A medalha de ouro foi atribuída à equipa "Os Quarks", constituída pelos alunos Beatriz L.G. Coelho, Madalena João C. Antunes e Ricardo R. Manso, acompanhados pela professora Maria Florinda R.B. Carrega, da Escola EB 2,3 Cidade de Castelo Branco. A medalha de prata foi atribuída à equipa "Eureka!", constituída pelos alunos Ana Carolina P. Abreu, João Pedro M. Dias e Rodrigo B. Cruz, acompanhados pela professora Cristina Isabel P.P.C. Albino, da Escola Evaristo Nogueira de S. Romão. A medalha de bronze foi atribuída à equipa "Os AlbiQuímicos", constituída pelos alunos Bruno M. Ribeiro, Mariana C.R.S. David e Renato M.F. Matos, acompanhados pela professora Rosa Maria Ribeiro, da Escola EB 2,3 Cidade de Castelo Branco. Finalmente, foi atribuída uma Menção Honrosa à equipa classificada em 4.º lugar, constituída pelos alunos Gonçalo T.S. Marques, Joana M.L. Cabaço e Mariana Q.E. Pereira, acompanhados pelas professoras Alexandrina Feliciano e Isilda Lourenço, da Escola Básica Integrada João Roiz de Castelo Branco. A semifinal da Olimpíadas da Química Júnior na UBI foi encerrada em clima de festa com a atuação da sempre animada e bem-humorada Tuna Académica "Já b'UBI & Tokuskopus", à qual se seguiu um lanche convívio.

A organização agradece à Reitoria da UBI e ao Banco Santander Totta pelo patrocínio e apoio a esta iniciativa, bem como à Rotoquímica e à Casa da Lagariça. Aos docentes do Departamento de Química, funcionários e, em especial, aos alunos do Departamento de Química dos 1.º e 2.º ciclos de es-



Equipa classificada em 1.º lugar e atuação da tuna nas OQJ na UBI

tudos em Química Industrial, Química Medicinal, Bioquímica e Biotecnologia, cuja colaboração foi essencial para levar a bom termo esta iniciativa, o nosso sincero agradecimento. A todos os participantes destas Olimpíadas, o nosso bem-haja pela vossa presença e entusiasmo.

**Maria de Lurdes Franco Ciríaco  
e Maria José Alvelos Pacheco**  
Organização das OQJ 2012 na UBI

### SEMIFINAL DAS OLIMPÍADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NA UNIVERSIDADE DO ALGARVE (FARO)

No dia 14 de abril decorreu, no Departamento de Química e Farmácia da Universidade do Algarve, mais uma edição das OQJ, este ano com 23 equipas inscritas, tendo havido oito desistências, das quais sete causadas pela falta do transporte que tinha sido inicialmente prometido pela Câmara Municipal de Albufeira, não tendo por isso este concelho tido a representação inicialmente prevista.

Participaram escolas dos concelhos de Olhão, Odemira, Loulé e Faro, podemos assim contar com 15 equipas envolvendo um total de 45 alunas e alunos dos oitavo e nono ano do ensino básico.

As provas tiveram uma componente prática, divida por quatro laboratórios, num total de 16 experiências distintas



envolvendo, quer a observação de fenómenos químicos, quer a realização das mesmas por parte dos concorrentes, e uma componente teórica, onde os concorrentes puseram à prova a sua capacidade de resolução de problemas e os seus conhecimentos de química.

A competição foi renhida tendo-se verificado a seguinte classificação:

#### 1.º Lugar

Equipa: Alexandre Carvalho, Paulo Cabrita e Raquel Jacob  
Escola Básica dos 2.º e 3.º Ciclos José Carlos da Maia – Olhão

#### 2.º Lugar

Equipa: Adriana Catarino, Anna Bogatyreva e Carolina Estevão  
Escola Básica dos 2.º e 3.º Ciclos Engº Manuel R. Amaro da Costa de Sto. Teotónio – Odemira

#### 3.º Lugar

Equipa: Beatriz Ferrinho, Catarina Barão e Ana Carolina Mendinhos  
Escola Básica dos 2.º e 3.º Ciclos de D. Afonso III – Faro

A organização contou com a colaboração dos técnicos do Departamento de Química e Farmácia, bem como de diversos docentes do mesmo departamento, e de alunos do Núcleo de Ciências Farmacêuticas e da Licenciatura em Bioquímica.

**José Moreira, Catarina Pires  
e Rosário Lopes**  
Organização das OQJ 2012  
na U. Algarve



Fotografias do ambiente vivenciado na semifinal de Faro e vencedores da prova (à direita)



## SEMIFINAL DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NA FACULDADE DE CIÊNCIAS DA UNIVERSIDADE DE LISBOA

Os participantes da semifinal das OQJ que decorreu no Departamento de Química e Bioquímica (DQB) da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL) começaram a chegar ao campus da FCUL bem cedo e, de acordo com o programa, a partir das 9h00 foram recebidos com um pequeno-almoço, gentilmente oferecido pela Presidência do DQB.

Pelas 10h00 teve lugar, num dos anfiteatros do edifício C8, a Abertura Oficial das OQJ, onde, após discursos alusivos ao evento dando as boas vindas aos participantes, foram enunciadas as regras. Seguiu-se um período de 2h e 30 min destinado à realização das provas, em que os participantes foram chamados a responder a um conjunto de 30 questões, algumas de carácter teórico, respondidas numa sala de aula, e outras de carácter mais experimental (observações experimentais, medições, etc.), montadas em triplicado em 3 laboratórios de química. Cada uma das 33 equipas foi monitorizada por um delegado da FCUL, recrutado entre alunos e docentes, responsáveis por acompanhar a prestação das equipas, pela deslocação destas entre as salas e os laboratórios, cronometrando os tempos de realização.

Seguiu-se o período do almoço. Enquanto eram corrigidas as provas, por um júri de 5 docentes do DQB, decorreu, num laboratório, um interessante conjunto de experiências preparado por alguns docentes do DQB, que, visivelmente, animou os participantes grande parte do período da tarde.

Eram 16h30min quando teve lugar a Sessão de Encerramento das Olimpí-

adas. A todos os participantes foram distribuídos prémios e diplomas de participação.

Na prova participaram alunos e professores de 17 escolas participantes: Colégio Pedro Arrupe, Escola Básica Integrada 1,2,3/JI Vasco da Gama, Escola Secundária 2,3 D. João V, Escola Secundária Dr. António Carvalho Figueiredo, Escola Secundária Miguel Torga, Escola Básica 2,3 Fazendas de Almeirim, Escola Básica 2,3 Roque Gameiro, Colégio Integrado Monte Maior, Escola Básica 2,3 S. Julião da Barra, Escola Secundária Alves Redol, Escola Secundária Ferreira Dias, Agrupamento de Escolas Damião de Goes, Escola Básica 2,3 dos Pombois, Colégio de São Tomás, Escola Básica JI de Ribamar, Escola Básica 2,3 dos Castanheiros e Colégio Vasco da Gama.

Após ter sido anunciada a posição de cada equipa, foram chamados ao palco todos os elementos das 3 equipas classificadas nos primeiros lugares e anunciados os 3.º, 2.º e 1.º classificados, a quem foram distribuídos os prémios e entregues as medalhas de bronze, prata e ouro, oferta da SPQ, acompanhadas de diplomas, para alunos e respetivas escolas.

### 1.º Lugar

Equipa: Jéssica C. Soares, Pedro A.S. Reis e Raquel R. Gama  
Escola EB 2,3 Roque Gameiro

### 2.º Lugar

Equipa: Beatriz P. Barata, João P.S. Correia e Raquel A. Ribeiro  
Colégio Vasco da Gama

### 3.º Lugar

Equipa: Ana Sofia G.S. Vicente, Catarina A.S. Cardeta e João M.G. Nunes  
Escola EB 2,3 de Fazendas de Almeirim

Mais um êxito desta iniciativa, pois foi geral o entusiasmo e o agrado com que participaram professores e alunos das escolas, muito se devendo ao empenho e colaboração de alguns docentes e alunos do DQB.

Agradecemos o patrocínio das seguintes entidades: Livraria Escolar Editora, Banco Espírito Santo (BES), Faculdade de Ciências da UL e Departamento de Química e Bioquímica.

**Maria Manuela G.S. Rocha  
e Carlos Manuel F.S. Borges**

Organização das OQJ 2012 na FCUL

## SEMIFINAL DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NO INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO (LISBOA)

A semifinal das Olimpíadas de Química Júnior no Instituto Superior Técnico (IST) iniciou-se com a receção aos alunos e professores acompanhantes pelas 10h00 na Torre de Química do IST. Estavam inscritas 24 escolas, tendo comparecido 19, num total de 27 equipas. De realçar a presença de uma equipa da Madeira (Escola Básica 2,3 Caniço), apesar do contexto económico atual.

As provas tiveram início pelas 10h30min, tendo as equipas sido agrupadas em "Famílias de elementos da Tabela Periódica". As provas envolveram observações, pequenas experiências e respostas a questionários e adivinhas em torno da Química, que ocuparam os alunos até cerca das 12h00. Os alunos foram guiados nesse percurso por professores do Departamento de Engenharia Química (DEQ) do IST e alunos do Núcleo de Engenharia Química (NEQIST) e acompanhados, nos laboratórios, por alunos do NEQIST.



Fotografias do ambiente vivenciado na semifinal no DQB-FCUL e vencedores da prova (à direita)

Após o almoço, servido na cantina do IST, oferecido pela Reitoria da Universidade Técnica, seguiram-se as já habituais sessões de “Luz sobre as moléculas”, apresentada pelos Profs. Mário Nuno Santos e Manuel Prieto, e “Show de azoto” pela Professora Clementina Teixeira.

Os participantes reuniram-se então num dos anfiteatros da Torre de Química para a divulgação dos resultados e para o encerramento das atividades. Aos professores do DEQ e alunos do NEQIST envolvidos nas atividades deste dia, agradecemos o seu apoio.

### 1.º Lugar

Equipa: Inês Claudino, Maria Rita Martins e Pedro Leitão  
Colégio Rainha D. Leonor (Caldas da Rainha)  
Prof. Acompanhante: Vasco Saraiva, Carolina Pires

### 2.º Lugar

Equipa: Beatriz Salvador, Ricardo Barroso e Tomás Velez  
Escola Secundária com 3.º Ciclo do Ensino Básico de Stuart Carvalhais (Queluz)  
Prof. Acompanhantes: Teresa Belo e Maria João Domingos

### 3.º Lugar

Equipa: Beatriz Andrade, Joana Duarte e João Cruz  
Colégio Infante Santo (Tremês)

Prof. Acompanhante: Ana Margarida de Almeida Rebelo

**Jorge Morgado**

Organização das OQJ 2012 no IST

## SEMIFINAL DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR NA UNIVERSIDADE DE TRÁS-OS-MONTES E ALTO DOURO (VILA REAL)

A 8.ª edição da semifinal das Olimpíadas de Química Júnior teve lugar no passado dia 14 de abril na Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro (UTAD). Esta iniciativa, sob a égide da Sociedade Portuguesa de Química, reuniu na UTAD alunos do 8.º e 9.º anos, de 14 escolas de vários concelhos da Região Norte, desde Ponte de Lima a Bragança, num total de 28 equipas e 83 alunos.

As provas consistiram na resolução de questões baseadas em observações e manipulações de experiências adequadas aos currículos daqueles anos de escolaridade.

Nesta edição, os três primeiros lugares foram conquistados pelas seguintes equipas:

### 1.º Lugar

Equipa “Quimicar”: Ana Catarina Salgado, Jéssica Sofia Lopes e Joana Maria Soares  
Escola Básica dos 2.º e 3.º Ciclos D. Manuel de Faria e Sousa, Felgueiras

### 2.º Lugar

Equipa “Oxigénios”: Alexandrina Campos Martins, Miguel Catela Feio e Laura Carneiro  
Escola Básica Integrada de Pedras Salgadas, Bornes de Aguiar

### 3.º Lugar

Ana Carolina Leitão, Jacinta de Fátima Pereira e José Pedro Lima  
Escola EB 2,3 da Correlhã, Ponte de Lima

De salientar que é o 3.º ano consecutivo que a escola de Felgueiras arrecada o 1.º lugar nas semifinais, o que não deixa de refletir o empenho, dedicação e entusiasmo do professor acompanhante, Pedro Goucho, pela Ciência Química.

Paralelamente às provas decorreu o 3.º Workshop de Gastronomia Molecular, onde participaram os professores acompanhantes das equipas participantes das Olimpíadas e que contou com a preciosa colaboração de vários alunos do 2.º ciclo em Biotecnologia de Qualidade Alimentar da UTAD.

As equipas classificadas no 1.º e 2.º lugares participaram na final que teve lugar no Instituto Superior Técnico (Lisboa) a 5 de maio.

**Cristina Oliveira, Maria João Carvalho e Paulo Santos**  
Organização das OQJ 2012 na UTAD



Fotografias do ambiente vivenciado na semifinal no IST e vencedores da prova (à direita)



Vencedores da semifinal na UTAD (da esquerda para a direita, equipas classificadas em 1.º, 2.º e 3.º lugares)

3<sup>rd</sup> PORTUGUESE YOUNG CHEMISTS MEETING – 3PYCHEM

A terceira edição do Portuguese Young Chemists Meeting realizou-se no Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (FCUP), de 9 a 11 de maio de 2012. À semelhança dos encontros anteriores (Lisboa 2008 e Aveiro 2010), o 3PYCHEM foi um êxito. A presente edição do PYCHEM teve como objetivo estimular o interesse dos jovens químicos portugueses e fomentar o intercâmbio de ideias entre as diversas áreas da química, bem como dar especial ênfase à ligação entre a investigação científica fundamental, a sua aplicação e o valor da inovação. O 3PYCHEM contou com a participação ativa da GALP Energia e DOW que contribuíram efetivamente para inserir no 3PYCHEM um espaço

de debate sobre o valor da inovação e desenvolvimento no mundo empresarial. Para além do apoio institucional da SPQ, FCUP e Reitoria da Universidade do Porto, o 3PYCHEM contou com o apoio e colaboração das empresas Hovione, GALP Energia, DOW, Paralab, Dias de Sousa, bisturi.net, Santander-Totta, Castellbell e Fundação EDP.

O elevado número de jovens investigadores participantes (189 participantes), a presença e participação ativa de alguns cientistas menos jovens com um percurso rico na área da investigação (5 sessões plenárias e 3 comunicações convidadas) e o rigor e qualidade científicos notáveis dos trabalhos apresentados (117 posters,

30 comunicações orais e 16 comunicações flash), contribuíram para o sucesso desta edição do PYCHEM. Nesta edição foram atribuídas 10 Bolsas “Hovione” que cobriam o valor da inscrição, e dois prémios que distinguiram as duas melhores comunicações em forma de poster, patrocinados respetivamente pelas empresas Paralab e Dias de Sousa. O programa social do evento incluiu um *sightseeing* pela zona antiga da cidade do Porto, uma visita e um jantar na emblemática Casa da Música. Contamos com a presença de todos na quarta edição do PYCHEM que será realizada em Coimbra em 2014. Até Breve!

**Comissão Organizadora do 3PYCHEM**  
(3pychem@spq.pt)



Cerimónia de abertura



Vencedora do prémio Portuguese Young Chemist Award e Grupo de Químicos Jovens



Vencedora de um dos prémios de melhor poster, patrocinados pela Paralab e Dias de Sousa

## INTERNATIONAL WORKSHOP ON IONIC LIQUIDS – SEEDS FOR NEW ENGINEERING APPLICATIONS (WILS 2012)

**From the WILS 2012 chairman opening address:**

... Today we must pay the tribute to a fantastic chemist but also an excellent problem solving in industrial chemistry – Dmitri Ivanovitch Mendeleev, died on 2 of February 1907, exactly 105 years ago...

In 1901 Mendeleev wrote:

“...We could live at the present day without a Plato, but a double number of Newtons is required to discover the secrets of nature and to bring life into harmony with the laws of nature...”

Let's try to discover the secrets of nature. I hope that tomorrow, when we close the workshop, we can find us richer (scientific and social), paving the way for partnerships and developing new products.

Realizou-se, nos dias 2 e 3 de fevereiro de 2012, na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL), a WILS 2012, uma Workshop Internacional subordinada ao tema Líquidos Iónicos (LIs) – Sementes para Novas Aplicações em Engenharia. Organizada pelo Centro de Ciências Moleculares e pelo

CREVER<sup>1</sup>, discutiu as novas aplicações dos líquidos iónicos e das suas misturas com outros solventes e/ou nanomateriais (selecionados criteriosamente), em duas áreas extremamente importantes para o desenvolvimento da química sustentável (verde): refrigeração por absorção e novos fluidos de transferência de ca-

lor. A workshop teve cerca de 70 participantes, a grande maioria de Portugal, Espanha e Alemanha, concretizou um dos objetivos da ação Marie Curie – New Working Fluids based on Natural Refrigerants and Ionic Liquids for Absorption Refrigeration e foi reconhecida pelo Comité da EURO-THERM<sup>2</sup> como o seu Seminário 97.



A organização, com o intuito de promover a discussão de trabalhos académicos numa tónica de possível aplicação industrial, convidou, para além de especialistas de reconhecido mérito, peritos de empresas ligadas à investigação, produção e comercialização de LIs. A participação da BASF SE, Ludwigshafen, Alemanha, da Evonik Industries AG, Hanau, Alemanha, da Io-Li-Tec, Ionic Liquids Technologies GmbH, Alemanha e da Solchemar Lda., Portugal, foi crucial para o sucesso desta workshop. Os trabalhos submetidos organizaram-se em duas sessões plenárias (a académica e a industrial), 18 comunicações orais (selecionadas pela organização, várias delas convidadas), abrangendo os temas LIs – Síntese e Caracterização, LIs e Refrigeração por Absorção e LIs – Processos e Transferência de Calor, e duas sessões de painéis (no total 40).

É de salientar os temas das lições convidadas que exibiram uma resposta perfeita ao desafio colocado pela organização, além de promoverem debates e discussões conclusivos e de bastante valor científico-tecnológico:

- 1) John D. Holbrey (QUILL, The Queen's University of Belfast, Reino Unido) – Developing new ionic liquid formulations for energy applications
- 2) Alberto Coronas (CREVER-URV, Espanha) – Towards the next generation of absorption heat pumps
- 3) Carlos Nieto de Castro (CCMM, FCUL, Portugal) – IoNanofluids – Will they be useful?
- 4) Klemens Massonne (BASF SE, Ludwigshafen, Alemanha) – Ionic Liquids at BASF SE: introduction and technical applications
- 5) Matthias Seiler (Evonik Industries AG, Hanau, Alemanha) – Industrial Progress: a new generation of commercially available working fluids for absorption chillers and heat pumps
- 6) Thomas J. S. Schubert (Io-Li-Tec, Ionic Liquids Technologies GmbH, Alemanha) – Brief overview about sorption media and thermal fluids
- 7) Luís Branco (Solchemar Lda., Portugal) – Ionic liquids from Solchemar as functional organic materials

A WILS2012, para além do patrocínio da Universidade de Lisboa, por ocasião da Comemoração do seu Centenário, e da Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Espanha, foi patrocinada pela SPQ, que a adicionou ao seu programa de comemorações do Ano Internacional da Química e do seu centenário, pelo ITQB - Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Universidade Nova de Lisboa, pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia, Portugal, pelo Departament d'Economia i Coneixement da Generalitat de Catalunya, Espanha, pela EVONIK Industries e pela BASF Portugal.

A WILS2012 foi acompanhada pelos media e por registo fotográfico (<http://wils.ccomm.fc.ul.pt/wils2012/media.php>), destacando-se o programa COM CIÊNCIA da RTP2 (22-2-2012), o vídeo realizado pelos SPUL, em português (<http://youtu.be/WN-P14OJg6yY>) e inglês (<http://youtu.be/5m5kRK4dPK4>) e a reportagem da Universidade aberta (<http://vimeo.com/channels/tfuab#37586088>).

Como conclusões relevantes desta workshop podem destacar-se os seguintes pontos:

- Apresentações orais excelentes, que permitiram discussões e aprendizagem muito interessantes sobre os principais problemas e tópicos propostos;
- Grande variedade de cartazes, muitos de excelente qualidade, o que promoveu contactos informais e discussões entre os participantes;
- Do ponto de vista técnico, houve várias recomendações relacionadas com a utilização/escolha de líquidos iónicos em diversas aplicações, a sua estabilidade a longo prazo e capacidade corrosiva, o seu valor comercial (deverá diminuir significativamente quando se desenvolver a produção industrial – é esperado um valor de 20 €/kg);
- Além da bem reconhecida aplicação como fluidos de transferência e armazenamento de calor, nomeadamente com os IoNanofluidos (baixo teor em nanomaterial), salientou-se a aplicação dos LIs como lubrificantes. Salientou-se

desejável a obtenção de sistemas de baixa viscosidade e, para muitas aplicações, se a corrosão for evitada, foram fortemente recomendados sistemas LI + água;

- Discutiu-se a aplicação de sistemas líquidos iónicos com água, dióxido de carbono e amoníaco na refrigeração de absorção, os prós e os contras da sua utilização em arrefecedores (“chillers”) e bombas de calor (redimensionamento pode ser um problema), sendo no entanto necessário uma análise custo/benefício. A nova legislação ambiental foi recomendada (existem incentivos para os fabricantes que podem acelerar estas aplicações e novos desenvolvimentos/investigações);
- Recomendou-se a substituição do amoníaco, porque o problema de toxicidade é ainda uma questão em aberto;
- Sobre a síntese de novos líquidos iónicos, os participantes recomendaram manter tão aberto quanto possível, não limitando os aniões e os catiões;
- O uso de aditivos e de misturas, em aplicações industriais, poderá resolver muitos dos problemas levantados pela utilização destes novos sistemas em aplicações de engenharia. Se existirem vantagens económicas e técnicas para o seu uso (o que os participantes pensam), todos os outros problemas serão resolvidos num futuro próximo;
- O Comité do NARILAR decidiu organizar uma outra reunião WILS 2013, por ocasião da COIL-5 (<http://coil-5.itqb.unl.pt>), 21-25 de abril de 2013, Vilamoura, Algarve, Portugal;
- Foram atribuídos dois Best Poster Awards, aos seguintes painéis:
  - PPD1-07 Encapsulated ionic liquids (EIL): from continue to discrete fluid for enhancing transport phenomena kinetics in separation and reaction applications, J. Lemus, J. Palomar, N. Alonso, J. Bedia, M.A. Gilarranz, and J.J. Rodriguez (Universidade Autónoma de Madrid, Espanha);

- PPD2-25 Liquid-liquid equilibria and transport studies of ternary systems composed of ionic liquid, 1-hexanethiol and n-dodecane, A.R. Ferreira, M.G. Freire, L.A. Neves, J.C. Ribeiro, F.M. Lopes, J.G. Crespo and J.A.P. Coutinho (Universidade de Aveiro, Universidade Nova de Lisboa e Galp Energia, Portugal).

Finalmente, é de destacar a excelente participação dos grupos nacionais que investigam os Líquidos Iónicos e as suas aplicações no nosso país,

desde a Universidade do Porto, passando por Aveiro, Coimbra, e até Lisboa (UL, UTL e UNL).

Por que foi uma workshop no meio académico, contou com a participação ativa de estudantes de 2.º e 3.º ciclos, o que demonstrou a total aceitação do tema pelos nossos alunos e uma forma de consolidarem matérias dadas em ambiente de sala de aula. Foi possível uma vivência realista, pouco comum no meio académico, e demonstrar que a interdisciplinaridade simbiótica da interação industria-universi-

dade é de extrema importância para o desenvolvimento tecnológico atual.

**Carlos Nieto de Castro**  
(ccastro@fc.ul.pt)  
Comissão Organizadora

<sup>1</sup> Grup d'Investigació d'Enginyeria Tèrmica Aplicada, do Departamento de Engenharia Mecânica da Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Espanha.

<sup>2</sup> O objetivo da EURO THERM é a promoção da Cooperação Europeia em Ciências Térmicas e Transferência de Calor, através da realização de ações de discussão e divulgação em que se envolvam cientistas e engenheiros (<http://www.eurothermcommittee.eu>). Tanto Carlos Nieto de Castro, como Alberto Coronas, são membros português e espanhol do Eurotherm Committee.



Aspeto da audiência



Fotografia de grupo



Carlos Nieto de Castro (FCUL)



Agílio Pádua (UBP)



João Fareleira (IST)



António Ferreira (FCTUC)



Rita Frade (FFUL)



Luís Santos (FCUP)



José Esperança (ITQB)



João Coutinho (UA)



Fernando Santos (FCUL)



Maria José Lourenço (FCUL)

## INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOLID COMPOUNDS OF TRANSITION ELEMENTS (SCTE2012)

Decorreu na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, entre 31 de março e 5 de abril de 2012, a conferência "18<sup>th</sup> International Conference on Solid Compounds of Transition Elements" (SCTE2012). O evento contou com a participação de mais de 200 participantes (Professores Universitários, Investigadores e Estudantes), originários de cerca de trinta países.

Nesta conferência foram apresentadas 5 lições plenárias, 7 keynotes, 52 comunicações orais e 146 painéis. Os trabalhos versaram essencialmente a química e física dos compostos intermetálicos, óxidos, hidretos, pnictetos e calcogenetos, tendo sido ainda reportados alguns estudos em organometálicos com propriedades magnéticas, óticas, elétricas, biológicas e catalíticas anormais.

O congresso iniciou-se com a lição plenária do Professor Hideo Hosono, do Instituto de Tecnologia de Tóquio, intitulada "Iron pnictide superconductors and relevant functional materials", onde foi feita uma revisão dos recentes progressos na investigação deste tipo de compostos. O Professor Hosono tem-se dedicado ao estudo dos materiais inorgânicos e dos óxidos semicondutores com hiatos elevados,

tendo recebido vários prémios, como o Achievement Awards da Sociedade de Química do Japão (2004) e o The Bernd T. Matthias Prize (2009), devendo-se a ele a descoberta, em 2008, dos pnictetos supercondutores de Fe. A preparação de pnictetos supercondutores de Fe foi descrita na keynote intitulada “Improved high pressure flux growth, structural, and superconducting properties of  $\text{LnFeAsO}$  ( $\text{Ln} = \text{Pr, Nd, Sm}$ ) single crystals”, proferida pelo Professor Nikolai Zhigadlo, do ETH de Zurique.

Um dos momentos altos deste Congresso foi a Sessão Especial dedicada ao Prémio Nobel da Química 2011. A keynote desta sessão, intitulada “Complex intermetallics - simpler than you think”, foi realizada pelo Professor Walter Steurer, do ETH de Zurique, a quem muito se deve no trabalho pioneiro sobre a estrutura atómica, formação e estabilidade dos quasicristais. A lição proferida mostrou de uma maneira simples como construir estruturas quasicristalinas a partir de agregados atómicos e a necessidade de utilizar dimensões superiores a três para descrever as suas estruturas. Em 2008, o Professor Steurer recebeu o prémio Jean Marie Dubois for Excellence in Quasicrystal Research, tendo sido até 2010 o Editor Chefe da revista “Zeitschrift für Kristallographie”.

Foram também realizadas as seguintes apresentações plenárias e keynotes:

- “PAC for intermetallic hydrides”, Professor João Gil, Universidade de Coimbra;

- “Magnetic properties of selected  $\text{MM}'\text{X}$ -type ( $\text{M}=\text{metal } 3\text{d}, \text{M}'=\text{metal } 3\text{d or } 4\text{d } \text{X}=\text{As,P,Ge,Si}$ ) intermetallics crystallize in hexagonal or orthorhombic crystal structure”, Professor Ryszard Zach, Universidade Politécnica de Cracóvia;
- “Cu, Pu and Fe high TC superconductors: all the same mechanism”, Professor Peter Wachter, ETH de Zurique;
- “Exotic Magnetism in Pt and Au nanoparticles”, Professor Juan Bartolomé, Universidade de Zaragoza;
- “Hydrogenation and electronic state of cerium”, Doutor Bernard Chevalier, Universidade de Bordéus;
- “Group 4 diboride – Ni interactions: a thermodynamic database for the B–Hf–Ni–Ti–Zr system”, Professor Gabriele Cacciamani, Universidade de Génova;
- “Relation between microstructure/nanostructure and stress development in TM-doped Mg-based alloys”, Professora Nataliya Skryabina, Universidade Estatal de Perm, Rússia;

onde foi dada especial ênfase à relação entre a estrutura e as propriedades físicas dos compostos.

A complexidade das ligações químicas em intermetálicos, boretos e carbonetos metálicos foi o tema da keynote “Metal-metal bonding in transition metal compounds: a direct space perspective”, realizada pelo Doutor Frank Wagner, do Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden. O Professor Mercuri G. Kanatzidis, da Universidade de Northwestern e do Laboratório Nacional

de Argonne, fechou a Conferência com a lição plenária “Metallic fluxes as a powerful media for discovery of complex intermetallics”, dedicada à síntese de intermetálicos, onde realçou a grande complexidade da sua química quando comparada com a dos compostos orgânicos.

Os temas de estudo do Professor Kanatzidis têm sido variados, destacando-se a química inorgânica, de estado sólido e de coordenação, e a química exploratória de compostos intermetálicos. Recebeu numerosos prémios, sendo de salientar a Morley Medal, da secção de Cleveland da Sociedade Americana de Química (2003) e a MRS Fellow, Sociedade de Investigação de Materiais (2010). É atualmente o Editor Chefe da revista “Journal of Solid State Chemistry”.

A próxima SCTE realizar-se-á na região de Génova, Itália, em maio de 2014.

#### AGRADECIMENTOS

A SCTE2012 contou com o apoio do European C-MAC ([www.eucmac.eu](http://www.eucmac.eu)), Termolab ([www.termolab.pt](http://www.termolab.pt)), PANalytical ([www.panalytical.com](http://www.panalytical.com)), El Corte Inglés ([www.elcorteingles.pt](http://www.elcorteingles.pt)), Sumol+Compal ([www.sumol-compal.pt](http://www.sumol-compal.pt)) e Divisão de Turismo da Câmara Municipal de Sintra ([www.cm-sintra.pt](http://www.cm-sintra.pt)).

**A.P. Gonçalves, R.P. Borges,  
M.D. Carvalho, E.B. Lopes,  
L.C.J. Pereira e Yu. Verbovytskyy**  
([apg@itn.pt](mailto:apg@itn.pt))  
Comité de Organização



Fotografia de grupo dos participantes no SCTE2012



Visão geral do auditório

Visite-nos em [www.spq.pt](http://www.spq.pt)

[Sociedade Portuguesa de Química](http://www.spq.pt)

Junte-se a nós!

Colabore connosco!



## PRÉMIO PYCA – GRADIVA 2012



O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da SPQ atribuiu no passado dia 10 de maio o **Portuguese Young Chemists Award (PYCA) 2012**, com o objetivo de premiar a investigação desenvolvida na área da Química por jovens investigadores durante o seu doutoramento, dando especial relevância ao impacto desta investigação na Sociedade.

O prémio, no valor monetário de 1000 € patrocinados pela Gradiva, foi entregue a Marta Correia da Silva, da Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto, com o trabalho intitulado *“Pequenas moléculas sulfatadas: ao serviço do coração”*. Foram ainda atribuídas duas menções honrosas: Carlos Lima, do Departamento de Química e Bioquímica da Universidade do Porto, pelo trabalho *“Como as moléculas sublimam...”* e Patrícia Santos,

do CESAM, Universidade de Aveiro, com o trabalho *“Chuva de Químicos?”*.

A edição de 2012 do PYCA-Gradiva 2012 recebeu um total de 24 candidaturas provenientes das mais diversas áreas da Química de jovens investigadores das Universidades de Aveiro, Porto, Minho, Madeira e Lisboa. A avaliação das candidaturas foi feita por um júri constituído por Carlos Baleizão (Instituto Superior Técnico e editor-adjunto do Boletim da SPQ), João Paiva (Faculdade de Ciências da Universidade do Porto e representan-

te da Gradiva), Raquel Soares (Faculdade de Medicina da Universidade do Porto e subdiretora do Ciência Hoje) e Tito Trindade (CICECO, Universidade de Aveiro).

Os nossos parabéns a todos os candidatos pela qualidade e excelência dos trabalhos apresentados e especialmente aos trabalhos premiados!

**Vânia Calisto, Sérgio Santos  
e Mariana Sardo**  
([gqj@spq.pt](mailto:gqj@spq.pt))

Direção do Grupo de Químicos Jovens



Patrícia Santos, Marta Correia da Silva e Carlos Lima na cerimónia de entrega do Prémio PYCA-Gradiva 2012, que decorreu na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto no passado dia 10 de maio

## CHEMRUS – QUÍMICA ONLINE: VENCEDORES DA EDIÇÃO 2012



O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) promoveu este ano a primeira edição do concurso ChemRus – Química Online, direcionado para alunos de Química do Ensino Secundário. Com esta iniciativa, o GQJ pretende contribuir para a dinamização do ensino da Química ao nível das Escolas Secundárias, incorporando também uma vertente lúdica e criativa. Para participar, cada grupo de participantes produziu um vídeo com a realização

de uma experiência química e respetiva ficha científica com a descrição detalhada da experiência e suas aplicações. Como resultado deste desafio, lançado aos alunos e professores de Química do Ensino Secundário, o GQJ recebeu 25 candidaturas de escolas distribuídas por todo o país. Desta adesão resultaram trabalhos interessantes e originais que foram colocados na web de forma a iniciar a criação de uma biblioteca online de experiências, que se pretende que venha a funcionar como uma ferramenta auxiliar nas aulas de Química.

A avaliação científica das candidaturas contou com a valiosa colaboração

dos professores Paulo Ribeiro Claro, Maria Otilde Simões e Sérgio Leal, a quem o GQJ gostaria de agradecer por terem contribuído de forma decisiva para o lançamento deste concurso. O júri destacou como vencedores, João Ribeiro, João Paulo Fernandes, Pedro Faria, Sandra Durães e Sara Neves, sob orientação da professora Fátima Sarmento, da Escola Secundária Francisco de Holanda, Guimarães, que concorreram com o trabalho intitulado *“Redox Fotogénica”*. Foram ainda destacados dois trabalhos com menções honrosas, provenientes da Escola Secundária Júlio Dantas, Lagos – *“Síntese de sulfato de tetraminocobre (II) mono-hidratado”* da au-

toria de Luís Amores, Melanie Matos, Miguel Sousa e Paulo Caldeira, sob orientação da professora Dina Albino e ainda “Análise elementar por via seca” da autoria de Afonso Gomes, Diogo Duarte, Luís Rodrigues e Vasco Ferreira, também sob orientação da professora Dina Albino. Todos os vídeos a concurso podem ser consultados em [www.spq.pt/gqj/](http://www.spq.pt/gqj/) ou [www.youtube.com/user/jovensquimicos](http://www.youtube.com/user/jovensquimicos).

A Escola vencedora – Escola Secundária Francisco de Holanda, Guimaraes

– foi premiada com um cabaz de material didático e de laboratório, cedido pelas empresas que patrocinaram o ChemRus – Porto Editora, Universidade de Aveiro, Paralab, Videq, Laborspirit, Industrial Laborum, Normax, ILC e José Manuel Gomes dos Santos. Agradecemos a excelente adesão que esta iniciativa teve por parte da indústria química. A cerimónia de entrega do prémio decorreu no dia 16 de maio de 2012, na escola secundária vencedora, onde a direção do GQJ foi gentilmente recebida.

Esperamos que o sucesso desta iniciativa possa ser reafirmado em edições futuras!

Vânia Calisto, Sérgio Santos  
e Mariana Sardo (gqj@spq.pt)  
Grupo de Químicos Jovens



Alunos e professora da Escola Secundária Francisco de Holanda, Guimarães, vencedores da primeira edição do concurso ChemRus – Química Online”

## DIVISÃO DE QUÍMICA ALIMENTAR – DIVULGAÇÃO DE NOTÍCIAS DA FCD-EUCHEMS



Sendo a SPQ membro da EuCheMS (European Association for Chemical and Molecular Sciences) e estando representada na Food Chemistry Division (FCD) da referida associação, foi recentemente criado um novo ende-

reço de e-mail (dqalim@spq.pt) com o objetivo de proceder à divulgação de notícias da FCD-EuCheMS, bem como contribuir para um contacto de maior proximidade com os sócios.

Considerando que o contacto de e-mail de diversos sócios membros da Divisão de Química Alimentar da SPQ, fornecido aquando da sua inscrição na SPQ, se encontra desatualizado, todos os interessados em receber as referidas mensagens deverão proceder à atualização do seu contacto através

do envio de uma mensagem para dqalim@spq.pt. Mais informações sobre a FCD-EuCheMS podem ser consultadas na página web <http://www.euchems.eu/divisions/food-chemistry.html>.

Todas as sugestões para fomentar a divulgação de informação/interação entre os sócios da Divisão de Química Alimentar são bem-vindas!

Joana Amaral (dqalim@spq.pt)  
Presidente da Divisão  
de Química Alimentar

## O FUTURO DA SPQ – Os QUÍMICOS JOVENS PORTUGUESES

Decorreu, de 9 a 11 de maio de 2012, o 3.º Encontro do Grupo de Químicos Jovens (ver notícia sobre o evento na página 10). Como Secretário Geral da SPQ, não posso deixar de me regozijar com o empenho e dedicação que a Ana Rita Figueira, a Inês Rocha, a Juliana Oliveira, a Marisa Rocha, a Ana Sofia Rodrigues, a Inês Valente (estudantes de doutoramento), o João Martins, a Christiane Santos (estudantes de mestrado), a Joana Reis e o André Barbosa (bolseiros de investigação) colocaram na realização deste evento.

A manutenção de instituições centenárias como a SPQ só pode ser conseguida pela renovação dinâmica dos seus corpos diretivos e pela sua capacidade de atrair novas gerações de membros empreendedores e participativos. Numa sociedade atualmen-

te dominada pela pequenez das economias de tesouraria, é refrescante e motivador testemunhar a vontade dos mais jovens, que colocaram temporariamente os seus projetos de investigação num plano secundário, a troco de alguns dias de ansiedade, nervosismos, pressão e responsabilidades acrescidas. Sem dúvida que a experiência contribuirá para o seu carácter e formação, e todos nós que estamos nestas andanças há vários anos sabemos que o único pagamento é feito

nesta moeda valiosa que é a satisfação de participar e contribuir para algo maior e duradouro. A motivação tem de partir de cada um e ser mantida por todos (jovens e menos jovens), apelando sempre à entrada de novo sangue, pois a história dos 100 Anos da SPQ faz-se do presente, constrói-se a cada novo dia que nasce.

**Joaquim Luís Faria** (jlfaria@fe.up.pt)

Secretário Geral da SPQ



Grupo de jovens organizadores do 3PYChem

## A CALORIMETRIA NÃO É DALTÓNICA...

No passado dia 3 de maio de 2012, o Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto teve o enorme prazer de escutar o Professor Watson Loh. Associado ao Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas, o Professor Watson Loh é um químico-físico que investiga, entre outras coisas, a termodinâmica da agregação e separação de fases em soluções de polímeros e da formação de sistemas aquosos bifásicos de interesse biológico. Este bem-disposto investigador presenteou a audiência com uma palestra intitulada: *Calorimetry is not color-blind: molecular information derived from calorimetric measurements in systems containing surfactants and/or polymers*.

O Professor Watson Loh destacou a calorimetria como o método de excelência para a medição de qualquer processo de transferência térmica. De uma forma divertida, mas sempre instrutiva e carismática, Loh evidenciou

o problema do ruído nas medições calorimétricas, comparando-o com a capacidade do Super-Homem distinguir um grito de desespero no meio de uma imensidão de ruídos de fundo. Seguidamente abordou um conjunto de investigações que estão a decorrer no Brasil sobre sistemas com surfactantes e polímeros. Mostrou claramente que os estudos calorimétricos de vários processos de agregação podem fornecer pistas de passos intermédios de reação, que não seriam detetados com outras técnicas de análise usadas na atualidade. Assim, Loh destacou a sensibilidade da calorimetria à análise de passos intermédios de reações. Além disso, ficou evidente que mesmo em processos tidos como atérmicos, uma análise calorimétrica passo a passo da reação lança luz sobre os processos de rearranjo molecular que intervêm na reação.

Em conclusão, a palestra do Professor Watson Loh permitiu refletir sobre

as vantagens da sensibilidade das técnicas calorimétricas e compreender que a calorimetria pode permitir inferir sobre alterações ao nível molecular num processo reacional.

O investigador brasileiro aproveitou também a oportunidade para divulgar a *International Conference on Chemical Thermodynamics (ICCT 2012)* e a *67<sup>th</sup> Calorimetry Conference (CALCON 2012)*, eventos que ser irão realizar entre 5 e 10 de agosto de 2012 em Búzios, Rio de Janeiro, Brasil (<http://www.icct2012.org>).

**Daniel Ribeiro**

(danielribeiro@gmail.com)

Licenciado em Química e Mestre em Ensino da Física e da Química pela FCUP

**Paulo Ferreira**

(paulo\_jferreira@live.com.pt)

Licenciado em Química e Mestrando em Química pela FCUP



## COMEMORAÇÕES DO CENTENÁRIO DA SPQ – SESSÃO NA POLITÉCNICA

Pelas 17h30min do passado dia 9 de fevereiro, realizou-se uma Assembleia Geral Extraordinária da SPQ, no preciso local onde, um século antes, a sociedade fora fundada (chamando-se então *Sociedade Chimica Portuguesa*). A convocatória da reunião encontra-se reproduzida abaixo.

Depois da abertura da sessão, pelo Presidente da Mesa da Assembleia Geral, Prof. Baltazar de Castro, e de algumas palavras de saudação pela Vice-Reitora da Universidade de Lis-

boa, Prof.<sup>a</sup> Teresa Cid, o Presidente da SPQ disse:

«Senhora Vice-Reitora da Universidade de Lisboa, Professora Dra. Teresa Cid, Senhor Presidente da Mesa da Assembleia Geral, Prof. Dr. Baltazar de Castro, Senhor Secretário Geral

Ilustres convidados

Caros Sócios da Sociedade Portuguesa de Química

Minhas senhoras e meus senhores

AGRADECIMENTO, MEMÓRIA, ESPERANÇA.

**AGRADECIMENTO** a todos os que contribuíram para que a Sociedade Portuguesa de Química chegasse ao seu primeiro centenário com ímpeto e obra feita. Não só os elementos dos sucessivos corpos gerentes, mas também os editores e autores de publicações, os representantes da Sociedade junto de diversos organismos e associações, nacionais e internacionais, os organizadores e oradores em Encontros científicos, os organizadores das Olimpíadas de Química, os palestrantes em escolas, e tantos, tantos outros, demasiado numerosos para poderem ser enumerados.

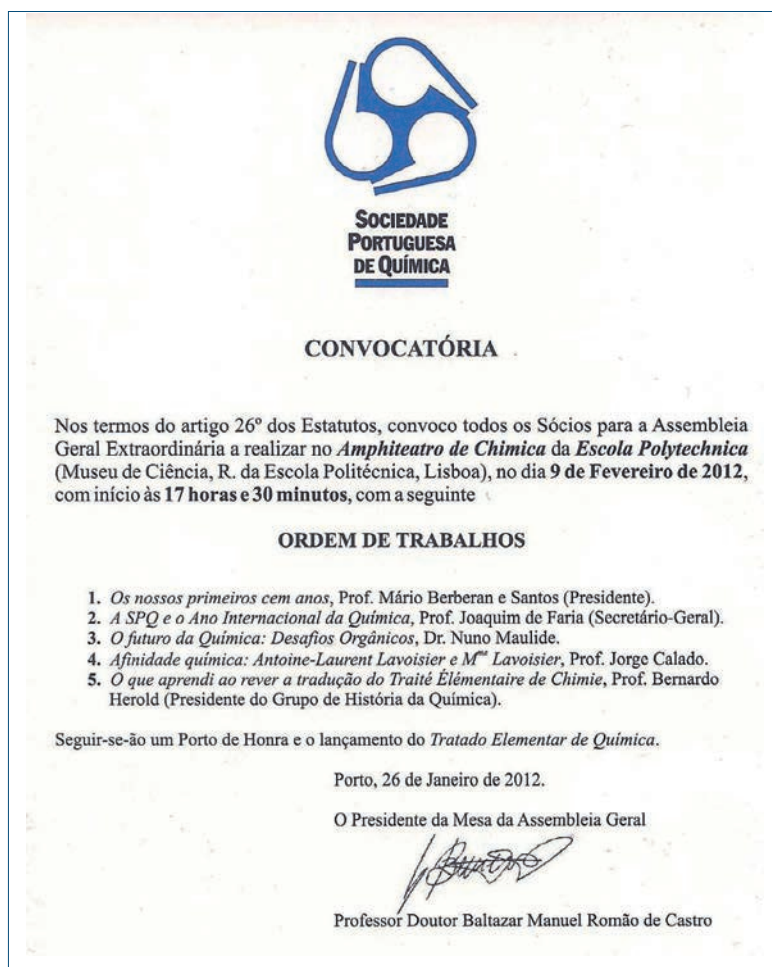
**MEMÓRIA**, para recordar os passos dados e os principais marcos, bem como os responsáveis pelos mesmos.

**ESPERANÇA**, pois seria coisa triste comemorar o passado sem acreditar no futuro. Ora o presente, perspetivado com o conhecimento do passado, dá-nos razões para essa crença.»

Apresentou de seguida (em projeção com *PowerPoint*) a história da SPQ, com os seus marcos e fotografias dos principais intervenientes, concluindo com uma caracterização da SPQ atual, as suas múltiplas atividades, e as perspetivas de futuro.

Seguiu-se o Secretário-Geral, Prof. Joaquim Luís Faria, comunicação registada no seguimento.

Das comunicações do Prof. Jorge Calado e do Dr. Nuno Maulide daremos conta no próximo número.



### QUÍMICA - Boletim da Sociedade Portuguesa de Química



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

Notícias e artigos sobre o mundo da Química

Fichas de Atividades práticas

Agenda de eventos

## UM ANO DE QUÍMICA, O ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA

JOAQUIM LUÍS FARIA\*



Foi no número 120 do QUÍMICA que lançamos o ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA (AIQ) em simultâneo com as comemorações dos 100 ANOS de SPQ, 1911-2011. Num apelo sincero pedia-se que, durante esse ano, cada sócio da SPQ, ainda mais que nos anos normais, fosse um divulgador convicto desta ciência junto dos seus amigos, familiares, colegas e conhecidos. Quando esse fascículo chegou às mãos dos nossos sócios, a máquina já estava em movimento e pela amostra contida nas (10) páginas do primeiro noticiário SPQ do AIQ percebia-se que o repto tinha sido plenamente aceite por todos.

E no espírito de celebrar nesse ano as contribuições das mulheres para a Química, o evento inicial foi protagonizado no feminino com o emblemático “Women Sharing a Chemical Moment in Time” – uma refeição global (era para ser um pequeno almoço) que teve lugar em 100 locais diferentes de 44 países espalhados pelo globo, ao longo de 24 fusos horários, iniciado em Wellington (Nova Zelândia) e terminado no Hawai. Estávamos a

18 de janeiro de 2011, ainda antes do lançamento oficial do AIQ 2011 (que ocorreu a 27-28 de janeiro). Em Portugal, o encontro entre químicas teve lugar em várias universidades e honras de cobertura televisiva (um dos raros eventos dado a tal distinção!) com divulgação nos telejornais nacionais, incluindo a entrevista a uma das organizadoras, a Prof. Filomena Camões.

Ao longo de 2011 e princípio de 2012, a SPQ registou mais de 500 eventos distintos, fruto do empenho de várias instituições, empresas e organizações que se associaram ao AIQ. A SPQ assumiu tão somente o papel de ponto focal nacional e funcionou enquanto dinamizadora, promotora e divulgadora das várias iniciativas que proliferavam por todo o país. Ciente das suas limitações e tendo em conta a conjuntura pouco favorável que se começava a desenhar nessa altura, a SPQ definiu como seus objetivos para a concretização nacional de um AIQ participado, a mobilização dos químicos, dos professores e dos estudantes de Química. Entendeu-se que seria essencial estabelecer o diálogo entre os departamentos de Química, Bioquímica e Engenharia Química, bem

como com os outros departamentos ou instituições onde a Química tivesse um papel relevante. Nesse sentido, foi criada, a 2 de dezembro de 2010, a Comissão Nacional para o Ano Internacional da Química/Centenário da SPQ, com a seguinte constituição:

- Jorge Calado – Presidente
- José Artur Martinho Simões – Vice-Presidente
- Mário Berberan e Santos
- Joaquim L. Faria
- João Paulo André
- Paulo Ribeiro Claro
- Margarida Bastos
- Maria João Ramos
- Carlos Nieto de Castro
- Paulo Mendes
- Cristina Galacho
- Sebastião Formosinho
- João Manuel Rodrigues
- Joaquim Marçalo
- Maria Paula Robalo
- Rosa Rego
- M. Isabel da Costa Ismael
- Rui Sant’Ovaia
- Ana Noronha

O papel desta Comissão Nacional era o de elaborar um programa único a nível nacional, capaz de aproveitar ao máximo os esforços dos vários grupos envolvidos e criar sinergias entre eles, coordenando e consolidando ações de diferentes áreas geográficas ou mesmo de diferente natureza. Pretendia-se garantir assim a realização de um leque de eventos adaptado a várias situações e públicos. A SPQ comprometia-se a usar os meios ao seu alcance para proporcionar a devida divulgação, de maneira a chegar ao maior número possível de pessoas, tentando desmistificar algumas ideias pré-concebidas sobre a Química, procurando entusiasmar os jovens e estimular a sua criatividade científica, ao mesmo tempo que procurava criar

\* Secretário Geral da SPQ (jlfaria@fe.up.pt)



no público em geral a consciência de que, pela sua natureza e predominância no mundo que nos rodeia, a Química é mesmo a ciência central.

Além do seu papel de promotora, a SPQ assumiu ainda a responsabilidade de apoiar parcial, ou totalmente, certos eventos que não conseguiam apoio de outra forma e que pela sua natureza justificavam uma atenção particular. Para tal foi necessário reforçar e adequar os meios humanos existentes e procurar o apoio financeiro que se tornou, à medida que o ano avançava, cada vez mais parcamente disponível, sobretudo devido ao clima de degradação económica que se vivia particularmente em Portugal (e no resto da Europa em geral). Foi por isso importante o contributo dos departamentos e instituições ligados à química, do poder local a vários níveis, dos institutos de turismo, da indústria química através de algumas das suas maiores empresas nacionais e de empresas multinacionais instaladas em Portugal, bem como de empresas de equipamentos, editoras nacionais, grupos financeiros e outras empresas sem ligação direta à química, mas com grandes responsabilidades na economia nacional. Seria injusto proceder à nomeação de todas elas aqui, mas constarão de um relatório exaustivo que será tornado público muito em breve, para que se possa apreciar a devida dimensão da conjugação de esforços levada a cabo.

De forma a aumentar a visibilidade e ajudar à penetração junto das camadas mais jovens, foi criado um portal dedicado ao AIQ 2011 ([www.spq.pt/quimica2011](http://www.spq.pt/quimica2011)) e um mural no *facebook*, que eram atualizados diariamente.

Paralelamente, tentou-se de forma continuada, mesmo insistente, a mobilização dos meios de comunicação social, tendo-se conseguido entrevistas na TVI e na agência LUSA, do presidente da Comissão Nacional, Prof. Jorge Calado. Uma participação alargada no programa Sociedade Civil (RTP) por parte do presidente da SPQ, o Prof. Mário Nuno Berberan e Santos. Cobertura televisiva da Noite da Química no IST (SIC). Participação no programa radiofónico “Semana da Química” (Rádio Renascença). Publi-



Página de entrada do portal dedicado ao AIQ 2011



Cartaz de divulgação do concurso escolar “A Química entre Nós...”

cação da peça jornalística “Um Dia na Vida de um Químico”, no jornal Público. Apesar de tudo, estes apontamentos complementados com outros pontuais em jornais de índole regional e escolar, atestam a dificuldade de se fazer passar a mensagem química através dos grandes meios de comunicação.

Foram produzidos vários elementos de *merchandising* no âmbito do AIQ e dos 100 ANOS SPQ, que incluíram posters publicitários, alfinetes, uma edição especial de um bilhete postal pelos CTT, sacos, fitas e autocolantes. No caso dos autocolantes, é de mencionar que se tratou de um trabalho artístico criado sobre os *slogans* concebidos por jovens no âmbito de um concurso nacional que correu escolas de todo o país. No fim foi necessário escolher 3 de entre cerca de 400 frases submetidas a concurso.

Um outro exemplo de concurso foi levado a cabo pela Bayer Portugal e pela Comissão Nacional da Unesco (em parceria com a Câmara Municipal de Lisboa e a Lisboa E-nova), que desafiaram os alunos do 1.º, 2.º e 3.º Ciclos das escolas públicas do Concelho de Lisboa a concluir de uma forma

original, através de texto ou de artes plásticas, o último capítulo dos livros de Maria Helena Henriques e de Maria José Moreno, “Terra Vita Sadia”.

No caso das ações para o grande público, são de referir as “Noites da Química” que ocorreram em Faro, Lisboa, Évora, Coimbra, Porto, Aveiro, Braga e Bragança. Nalguns casos, estas ações decorreram associadas à “Noite dos Investigadores” e foi uma forma de permitir o contacto direto entre cientistas e jovens, bem como permitir aos mais novos participar em várias experiências de bancada sob a supervisão de investigadores: os miúdos (e alguns graúdos) puderam produzir e provar deliciosos gelados, fabricar bolas saltitonas e interrogar a seu bel-prazer investigadores sobre os seus projetos em curso, ou simplesmente sobre temas químicos em sessões de *speed-dating*.

A SPQ foi ainda convidada a participar na produção do Pavilhão da Ciência da Festa do Avante, proporcionando uma viagem química aos milhares de visitantes que aí se deslocaram. A SPQ contribuiu ainda para o programa de palestras sobre a química que



**Notas Químicas**  
*Borodin: compositor e químico*  
*Quando a Música e a Ciência se cruzam no Laboratório Químico ...*

**Comemorações do Centenário da Universidade de Lisboa, do Centenário da Faculdade de Ciências e do Ano Internacional da Química**

**Sexta-feira, 1 Julho, 18 horas**  
 Maria Cortsevikaya, Mezzo-soprano  
 Natalia Tchitch, Viola  
 Rosa Maria Barrantes, Piano  
 Obras de Borodin, Glínka, Rimsky-Korsakov, Balakirev e Brahms

**Sábado, 2 Julho, 18 horas**  
 Filipe Pinto-Ribeiro, Piano  
 Obras de Borodin, Beethoven, Liszt e Mussorgsky

**Quinta-feira, 7 Julho, 18 horas**  
 Quarteto de Cordas Mallbran  
 Tatiana Samouil, Violino  
 Jolente De Maeyer, Violino  
 Tony Nys, Viola  
 Justus Grimm, Violoncelo  
 Rosa Maria Barrantes, Piano  
 Tiago Pinto-Ribeiro, Contrabaixo  
 Obras de Borodin, César Viana e Schubert

**Sexta-feira, 8 Julho, 18 horas**  
 Quarteto de Cordas Mallbran  
 Tatiana Samouil, Violino  
 Jolente De Maeyer, Violino  
 Tony Nys, Viola  
 Justus Grimm, Violoncelo  
 Filipe Pinto-Ribeiro, Piano  
 Obras de Borodin, Schumann e Vianna da Motta

Anfiteatro do *Laboratório Químico*, Museu de Ciência da Universidade de Lisboa  
 Rua da Escola Politécnica 58 Lisboa  
**Entrada 10€** Inclui Caderno de Laboratório com programa

Concepção e direcção: Maria José Lourenço  
 Departamento de Química e Bioquímica,  
 Centro de Ciências Moleculares e Materiais  
 da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa

Reservas por telefone 213 921 808/83 ou geral@museus.ul.pt

Cartaz de divulgação da iniciativa “Notas Químicas – Borodin Compositor e Químico”

ANO INTERNACIONAL DA QUÍMICA 2011

**O GRANDE MUSICAL DA QUÍMICA**

*Teatro do Sol*  
 Escola Salesiana Colégio dos Irmãos do Porto  
 Escola Secundária Inês de Castro  
 Escola Secundária João Gonçalves Zarco

**RIVOLI**  
 TEATRO MUNICIPAL  
 GRANDE AUDITÓRIO  
 JUNHO 20 21h30 21 10h30 e 15h30

Cartaz de divulgação da peça de teatro “O Grande Musical da Química”

teve lugar durante o festival e esteve envolvida na realização de uma exposição itinerante sobre a química que após a sua inauguração nessa festa, correu já várias escolas do país. Várias outras exposições e mostras documentais foram apresentadas por todo o país.

No campo das expressões artísticas foi levada à cena a peça “Falácia” de Carl Djerassi (tradução de Manuel João Monte), pela Seiva Trupe do Teatro do Campo Alegre, com direcção de Júlio Cardoso, que teve a particularidade da estreia portuguesa ter tido lugar na data de aniversário do autor, que estando presente recebeu do público uma enorme salva de parabéns. A música também esteve presente na iniciativa “Notas Químicas – Borodin Compositor e Químico”, patrocinada pela SPQ – um conjunto de concertos concebidos para mostrar ao público como música e ciência se podem cruzar de forma compatível e harmoniosa. O evento foi da responsabilidade do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL) e do Museu de Ciência da Universidade de Lisboa.

Num registo distinto, mais virado para um público infanto-juvenil, estreou a 20 de Junho, no Teatro Rivoli do Porto, “O Grande Musical da Química”, baseado no livro “Breve História da Química” da professora Regina Gouveia, publicação coeditada pela SPQ (ver artigo no QUÍMICA 122).

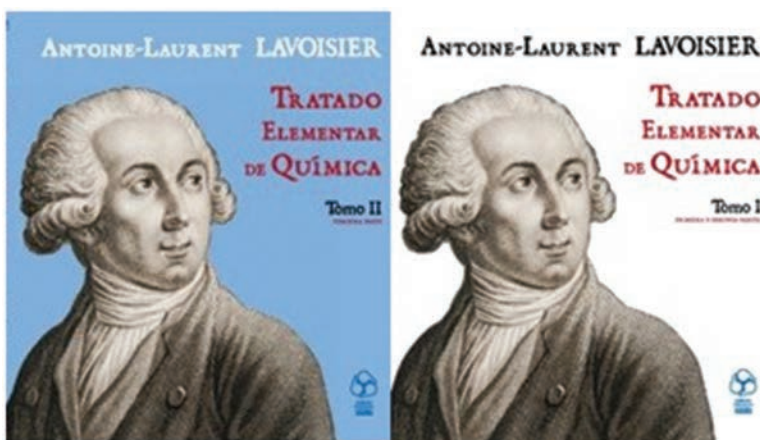
A SPQ foi ainda coeditora do livro “A História Química de uma Vela”, de Michael Faraday (Imprensa da Universidade de Coimbra), tradução de Maria Isabel Prata e Sérgio Rodrigues, cuja edição em português serviu de pretexto para a recriação das experiências aí contidas, nos Museus da Ciência de Lisboa e de Coimbra, pelo próprio Dr. Sérgio Rodrigues, assistido pela Dr<sup>a</sup> Filipa Oliveira, e ainda na Faculdade de Ciências da UP.

No centenário da sua fundação, e também associado ao AIQ, foi editada pela SPQ, uma cuidada tradução (Emídio C. Queiroz Lopes) do “Tratado Elementar de Química”, de Antoine-Laurent Lavoisier, com o apoio das empresas Solvay e Hovione. O

lançamento desta obra, com apresentação pelo Prof. Bernardo Herold, Presidente do Grupo de História da Química, teve lugar a 9 de fevereiro de 2012, numa sessão comemorativa do Centenário da SPQ no Amphiteatro de Chimica da Escola Polytechnica (Museu de Ciência), em que para além de intervenções do Presidente e do Secretário-Geral, sobre o centenário e sobre o Ano Internacional da Química, respetivamente, foram apresentadas as palestras, “O futuro da Química: Desafios Orgânicos,” pelo Dr. Nuno Maulide (Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr, Alemanha) e “Afinidade Química: Antoine-Laurent Lavoisier e Mme Lavoisier,” pelo Prof. Jorge Calado (Presidente da Comissão Nacional para o Ano Internacional da Química/ Centenário da SPQ).

Precisamente a 9 de maio, mas desta feita de 2011, ainda no mesmo espaço, fora feito o lançamento de um dos mais belos livros de química escritos em português, “Haja Luz! Uma História da Química Através de Tudo”, da autoria do Prof. Jorge Calado (IST Press).

Um dos pontos altos de 2011 foi sem dúvida a realização do XXII Encontro Nacional, organizado pela Delegação de Braga da Sociedade Portuguesa de Química e pelo Departamento de Química da Universidade do Minho, numa comissão presidida pelo Prof. João Paulo André, que decorreu em Braga, no Parque de Exposições, de



Capas dos dois volumes da tradução do “Tratado Elementar de Química”

3 a 6 de julho de 2011. O Encontro, subordinado ao tema “Cem Anos de Química em Portugal”, estava integrado nas comemorações do Centenário da SPQ e do Ano Internacional da Química e contou com o concurso das Divisões de Química Alimentar, Química Analítica, Química Física, Química Inorgânica, Química Orgânica e do Grupo de Radicais Livres, que viram realizados os seus encontros sectoriais sob a forma de Simpósios (respetivamente o 10.º Encontro de Química dos Alimentos, o 7.º Encontro Nacional de Química Analítica, o 10.º Encontro Nacional de Química Física, a 9.ª Conferência de Química Inorgânica, o 9.º Encontro Nacional de Química Orgânica e o 8.º Encontro do Grupo de Radicais Livres).

Durante o Encontro teve lugar a lição plenária do Prémio Ferreira da Silva,

a cargo do Prof. Fernando Pina, tendo sido igualmente atribuída a Medalha Vicente Seabra *ex aequo* ao Dr. Eurico José da Silva Cabrita e ao Dr. José Richard Baptista Gomes. Pela primeira vez, foi também entregue o Prémio Romão Dias, no domínio da Química Inorgânica, à Prof. Maria José Diogo da Silva Calhorda.

Tudo isto e muito mais (ver QUÍMICA 120-125) contribuiu para que Portugal tivesse um dos mais extensos e completos programas para o Ano Internacional da Química.

Os resultados desse programa não serão facilmente mensuráveis ou visíveis, no entanto bastará que algures no futuro, um qualquer químico diga que foi naquele ano de 2011 que se apercebeu da sua vocação para que tenha valido a pena.

## APRESENTAÇÃO DA TRADUÇÃO PORTUGUESA DO *TRAITÉ ÉLÉMENTAIRE DE CHIMIE DE LAVOISIER*\*

BERNARDO HEROLD\*\*

A Sociedade Portuguesa de Química encarregou o seu Grupo de História da Química de rever a tradução portuguesa do *Traité Élémentaire de Chimie*. Como Presidente desse Gru-

po coube-me fazer essa revisão final. Em face dum excelente manuscrito do autor da tradução, Emídio Queiroz Lopes, e das muitas utilíssimas notas marginais com que a enriqueceu, foram raras as questões a merecer uma troca de impressões. Apesar disso, a tarefa foi demorada, tendo que confessar-me por isso como o principal culpado de este lançamento ocorrer tão



\* Texto baseado na apresentação da obra, efetuada no dia 9 de fevereiro de 2012 no Amphiteatro de Chimica da Escola Polytechnica (Museu de Ciência, R. da Escola Politécnica, Lisboa)

\*\* Presidente do Grupo de História da Química (herold@ist.utl.pt)

tardamente. Suponho que haja poucos leitores que recentemente tenham lido o *Traité* com tanto pormenor como aquele a que fui obrigado. Essa leitura foi muito instrutiva em vários aspetos: embora seja evidente que a novidade do *Traité* tenha resultado da utilização consequente dos conhecimentos novos sobre o oxigénio e o seu papel na combustão e na formação das “cales”, tal como a dos ácidos a partir dos elementos, bem como duma nomenclatura nova e sistemática, a leitura chamou-me também a atenção para outros aspetos normalmente menos valorizados. Lavoisier, além de dar essa arrumação diferente às matérias, usar uma sistematização e nomenclatura completamente novas e abandonar a doutrina do flogisto, também revela ao leitor um vastíssimo tesouro de conhecimentos químicos herdados do passado e apresentados por alguém com uma elevada competência, mesmo nas mais difíceis operações laboratoriais. Esse tipo de saberes só se pode adquirir trabalhando durante bastante tempo num laboratório químico sob a orientação dum profissional experiente. Isso sabe-se porque os estudos de inúmeras biografias de químicos revelam que não se encontra nenhum investigador, dentro de os que deixaram uma pegada significativa na história da química, que não tenha passado por essa experiência. Podem assim estabelecer-se autênticas genealogias de transmissão desses “segredos” da profissão. Quanto mais se recua no tempo, mais essas genealogias se fundem com as da medicina e farmácia, tendo grande parte delas a sua origem num dos grandes vultos da medicina renascentista das universidades do norte da Itália, como por exemplo em Falópio. Para Lavoisier também é possível encontrar uma genealogia dinástica. Frequentou o laboratório químico da farmácia de Guillaume François Rouelle (1703-1770) em Paris, que também foi demonstrador da cadeira de química do *Jardin du Roi*, mais tarde denominado *Jardin des Plantes*. Este jardim foi fundado em Paris no reinado de Luís XIII, em 1635, pelo médico Guy de la Brosse, como horto medicinal. Mas é, além disso, uma das mais antigas instituições oficiais de ensino em França, tendo tido logo desde o início três cadeiras: Botânica, Química

e Anatomia. Embora, devido aos ciúmes da Sorbonne, não estivesse autorizado a conferir diplomas, tornou-se um local de aprendizagem da ciência mais moderna da época. Talvez mais ainda do que os catedráticos, foram os chamados demonstradores que transmitiam as artes dos boticários de manipularem substâncias químicas. Assim, Christoph Glaser, formado em medicina pela universidade de Basileia, ensinou no *Jardin du Roi* de 1660 a 1671, orientando o boticário Nicolas Lémery, que se tornaria o catedrático de Química de 1730 a 1743. Este teve como discípulo Johann Gottlieb Spitzley, boticário em Paris, em cuja farmácia estagiou o mestre de Lavoisier, Rouelle, que por sua vez foi demonstrador de Química no *Jardin du Roi* de 1743 a 1768. Curiosamente, o próprio Lavoisier nunca formou nenhum discípulo que se poderia considerar como continuador duma dinastia. A importância da herança recebida pelo convívio no laboratório com um mestre experiente nas operações químicas não está no entanto mencionada diretamente no “Discurso Preliminar”, em que Lavoisier, antes pelo contrario, dá toda a importância à sua filiação na filosofia do Abade de Condillac (Étienne Bonnot de Condillac, 1715-1780), sobre as origens de todo o conhecimento humano nas sensações, como argumento a favor da importância das observações e medições na edificação da ciência química. A riqueza resultante da transmissão da experiência laboratorial através das gerações na formação de Lavoisier ainda assim se manifesta, em certa medida, na terceira parte do *Traité* “Descrição dos Aparelhos e das operações manuais da Química”. Na introdução<sup>1</sup>, escreve “... estou longe de pretender que aqueles que queiram adquirir conhecimentos exactos em Química possam dispensar-se de seguir cursos, frequentar laboratórios e de se familiarizar com os instrumentos que se empregam. *Nihil est in intellectu quod non prius fuerit in sensu*: grande e importante verdade que nunca devem esquecer tanto aqueles que aprendem como os que ensinam e que o célebre Rouelle mandou escrever em grandes caracteres no lugar mais evidente do seu laboratório.” Todo o *Traité* nos faz lembrar que foi escrito no Século das Luzes. O espírito com que nele Lavoisier aliou saberes existen-

tes nas academias com as técnicas dos praticantes duma profissão teve claramente como modelo a *Encyclopédie ou Dictionnaire raisonné des sciences, des arts et des métiers* que Denis Diderot (1713-1784) e Jean le Rond D’Alembert (1717-1783) poucos anos antes tinham completado. É curioso notar que Diderot também se encontra entre os que frequentaram o laboratório de Rouelle. Um aspeto que também salta aos olhos de quem lê a terceira parte do *Traité* é a qualidade dos instrumentos laboratoriais descritos. Alguns são verdadeiras obras de engenharia! Só alguém com uma fortuna tão grande como a de Lavoisier e o poder que este exercia sobre as oficinas do arsenal do exército é que podia mandar construir aparelhos daquela complexidade!

Viremo-nos agora para a tradução em si: tal como mencionei no prefácio “Embora a obra tenha sido traduzida para várias línguas, pouco tempo após a sua publicação em Paris no ano de 1789 (entre 1790 e 1801 foram publicadas uma tradução inglesa, reimpressa várias vezes nos Estados Unidos, duas alemãs, uma holandesa, três italianas e duas espanholas), nunca foi, até agora, publicada nenhuma tradução portuguesa.” Ao escrever o prefácio, não tinha todavia ainda conhecimento da publicação, quase simultânea, daquela que agora se apresenta, duma outra tradução do *Discours préliminaire* organizada e comentada por Palmira Fontes da Costa [1] e patrocinada pela Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa. Quanto à tradução do *Traité* na sua totalidade que agora se apresenta, um dos aspetos mais importantes tido em conta, tanto pelo tradutor, como na revisão, foi evitar anacronismos na terminologia. Por um lado havia o risco de, ao usar uma terminologia própria da época de cerca de 1800, tornar a leitura do texto demasiado hermética. Por outro lado, uma terminologia moderna, mais familiar a um leitor de hoje, podia falsear a autenticidade da tradução. Para poder usar na tradução, na medida do possível, uma linguagem própria da época em que o *Traité* foi escrito, foi muito útil a consulta de duas obras fundamentais, ambas da autoria de Vicente Coelho da Silva Seabra e Telles (c.1764-1804), natu-



ral do Brasil, nomeadamente os “Elementos de Chimica” [2] e a tradução e adaptação portuguesa de 1801 da Nomenclatura Química de Morveau, Lavoisier, Berthollet e Fourcroy [3]. Ainda há poucos dias a investigadora brasileira Alessandra Oliveira Harden, da Universidade de Brasília e do University College Dublin, me pediu uma cópia da introdução de Seabra à segunda destas obras. Devido à leitura dos seus trabalhos que me enviou [4], bem como do livro que nos seus artigos cita sobre a Casa Literária do Arco do Cego [5], estou em condições de acrescentar um pouco mais à especulação que fiz no prefácio sobre as razões de o *Traité* não ter sido traduzido em português durante a época em que se publicaram traduções em várias outras línguas europeias. As edições da Casa Literária do Arco do Cego, durante a sua efémera existência de 1799 a 1801, albergou um projeto absolutamente ímpar no Antigo Regime de publicação de várias dezenas de traduções de obras científicas publicadas em francês, inglês, alemão e italiano. De acordo com os estudos que esta investigadora faz, das dedicatórias e prefácios destas traduções, este programa editorial constituiu uma tentativa de introduzir a ciência iluminista em Portugal debaixo do patrocínio do Príncipe Regente D. João. Os tradutores eram na sua grande maioria oriundos do Brasil e pertenciam à elite da Nação que duas décadas mais tarde se iria fundar. As obras destinavam-se claramente a instruir os jovens futuramente responsáveis pelo desenvolvimento económico do Brasil. As obras escolhidas eram assim de carácter eminentemente aplicado, incluindo as de matemática, visto estas se poderem justificar como indispensáveis para a prática da engenharia, da navegação e da cartografia. A nomenclatura química integrava-se perfeitamente neste espírito, dado que para fins alfandegários, fiscais e sanitários, era essencial que os nomes para as substâncias fossem rigorosos, não deixando margem para qualquer ambiguidade. É curioso notar que ainda hoje os utilizadores mais assíduos da nomenclatura IUPAC são a Organização Mundial da Saúde e as autoridades da União Aduaneira do espaço económico europeu e de outros espaços económicos. No prefácio

apontei duas razões possíveis para o *Traité* não ter sido traduzido em português por volta de 1800. Uma das que citei foi o facto de os *Elementos de Chimica* de Seabra, publicados praticamente em simultâneo com o *Traité*, ser uma obra que já incorporava a química nova de Lavoisier. A outra foi ter-se publicado em 1801 a tradução, também de Seabra, da Nomenclatura moderna. Esta é mais do que uma tradução, mas antes um texto multilingue português, francês e latino que pode ser utilizado como dicionário, facilitando assim a um português a leitura do texto francês do *Traité*.

Sejam quais forem as razões de não se ter traduzido na mesma altura o *Traité*, não há dúvida que a tradução que agora se apresenta continua a ser muito oportuna. Cerca de 1800 teria sido muito útil a quem queria estudar a Química contemporânea. Agora, obviamente, o interesse é para quem estude a História da Ciência, em particular a da Química.

## EPÍLOGO

Posteriormente ao meu discurso de apresentação da tradução do *Traité*, um improviso que neste texto tentei reproduzir de memória, li com mais vagar os trabalhos acima citados sobre a Casa Literária do Arco do Cego e reli o discurso preliminar do *Traité*, bem como a introdução à terceira parte do mesmo. Daí julgo poder acrescentar mais algumas reflexões sobre as possíveis razões de o *Traité* não ter sido integrado no programa de traduções da Casa Literária do Arco do Cego, tão generosamente financiado pelo erário real através da influência do ministro D. Rodrigo de Sousa Coutinho.

Esse conjunto de traduções de livros de ciência iluminista obedeceu a um critério utilitário específico, tendo em vista a instrução dos jovens que futuramente seriam responsáveis pela economia do Brasil.

O *Traité*, pelo contrário, ultrapassa esses limites, ao fazer no discurso preliminar e em várias passagens a apologia do sensismo de Condillac. Esta tese gnosiológica era possivelmente vista pelos detentores do

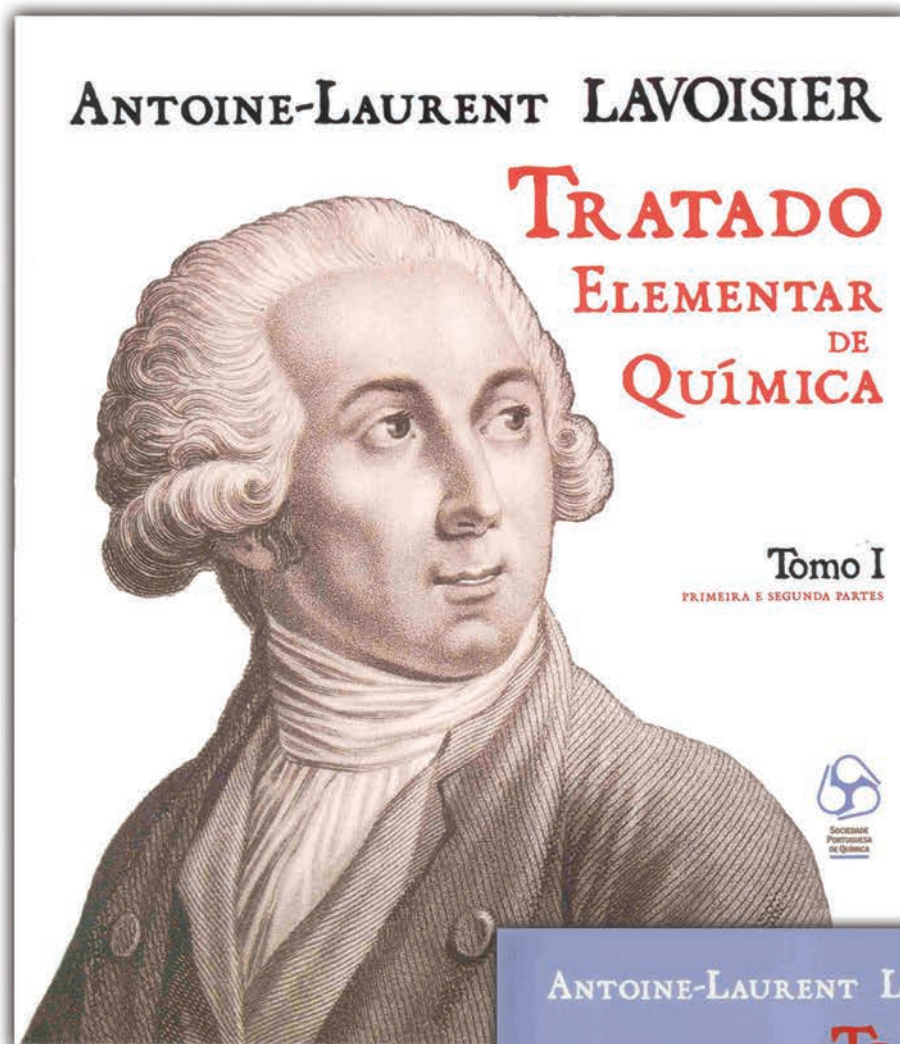
poder como demasiado controversa para que o *Traité* se pudesse considerar como destinado exclusivamente a finalidades úteis ao país e não para a propagação de ideias vistas como revolucionárias. Apesar de existir alguma plausibilidade nesta e nas outras explicações anteriormente mencionadas para o *Traité* não ter sido traduzido, não se pode tirar nenhuma conclusão segura sobre qual das possíveis razões terá pesado mais, ou se não terá havido outras.

## NOTA

<sup>1</sup> Na página 216 da tradução.

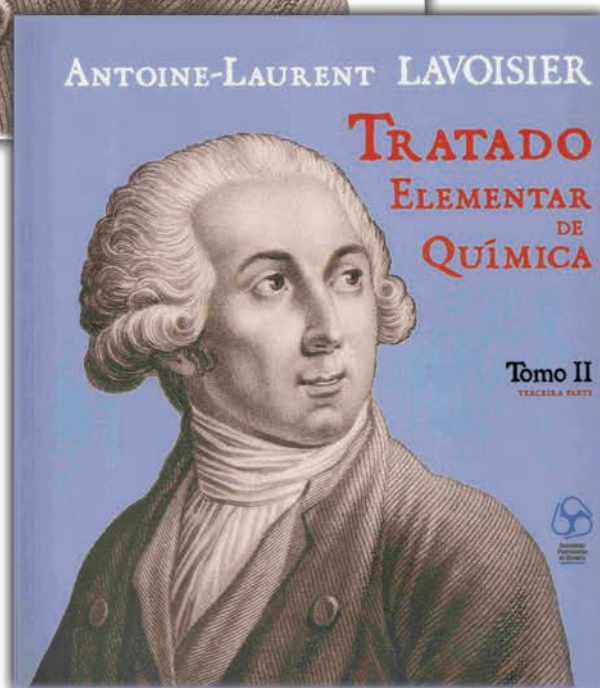
## REFERÊNCIAS

- [1] Palmira Fontes da Costa (org.), *Manifesto para uma Nova Química*, Palavrão, Associação Cultural. Chancela. Núcleo de Edição, Lisboa 2011.
- [2] Vicente Coelho de Seabra, *Elementos de Chimica*, Real Officina da Universidade, Coimbra 1788 (Parte I e 1790, Parte II), edição facsimilada org. António J. Andrade de Gouveia, Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia. Universidade de Coimbra 1985.
- [3] Vicente Coelho de Seabra Silva Telles, *Nomenclatura Chimica Portuguesa, Franceza e Latina, a que se ajunta o Systema de Caracteres Chímicos adaptados a esta Nomenclatura por Haffenfratz* [sic, em lugar de Hassenfratz] e *Adet*. (Tradução, e adaptação com uma introdução de *Méthode de Nomenclature Chimique proposée par MM. de Morveau, Lavoisier, Berthollet & De Fourcroy*, Cuchet, Paris 1787), Typographia Chalcographica, Typoplastica e Litteraria do Arco do Cego, Lisboa 1801.
- [4] Alessandra Ramos de Oliveira Harden, Brasileiro Tradutor e/ou Traidor: Frei José Mariano da Conceição Veloso, *Cadernos de Tradução*, **2009**, 1/23, 131-148; Manoel Jacinto Nogueira da Gama: Ciência e Tradução no Final do Século XVIII, *Tradução em Revista*, **2010/1**, 01-19, ISSN 1808-6195; Os tradutores da Casa do Arco do Cego e a ciência iluminista: a conciliação pelas palavras. *Trab. linguist. apl. Campinas*, **2011**, 50/2, 301-320, ISSN 0103-1813.
- [5] M. F. Campos (org.), *A Casa Literária do Arco do Cego: Bicentenário (1799-1801)*. Biblioteca Nacional e Imprensa Nacional, Casa da Moeda, Lisboa 1999.



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

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



**TOMO I e II**

P.V.P.: 32 euros

Sócios da SPQ: 20 euros

**ENCOMENDAS À SPQ**

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

Telefone: 21 793 46 37

email: sede@spq.pt



## REUNIÃO ANUAL DO CHEMPUBSOC EUROPE, LISBOA, 20-21 DE ABRIL



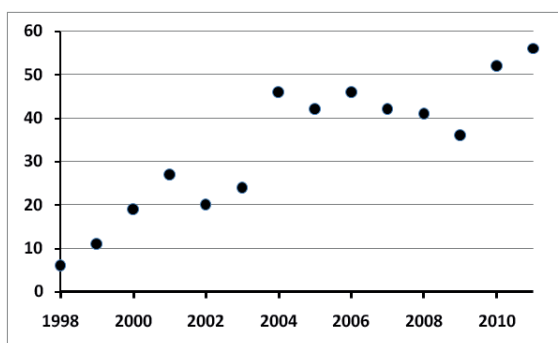
Em homenagem à SPQ pelo seu centenário, o consórcio editorial *ChemPubSoc Europe* (CPSE), que congrega 16 sociedades químicas europeias (de 15 países) e a editora Wiley-VCH, realizou desta vez a sua reunião anual em Lisboa. Para além do Presidente e da Vice-Presidente da SPQ, estiveram presentes representantes das sociedades de química da Alemanha, Áustria, Bélgica, Eslováquia, França, Holanda, Hungria, Itália, República Checa, Suécia e Suíça, e também da Wiley-VCH (incluindo os editores das revistas *Angewandte Chemie* e *Chemistry – A European Journal*), num total de 20 participantes. Por problemas de saúde de última hora, não participaram os representantes de Espanha e da Polónia. A Grécia não se faz representar há vários anos.

Foi, como sempre, dia e meio de trabalho intenso, mas com tempo para uma curta deslocação em fim de tarde ao Museu e Laboratório Chimico da Escola Politecnica, onde houve uma visita guiada pela Dr<sup>a</sup> Marta Lourenço, muito apreciada pelos participantes, e a que se seguiu um jantar no Terreiro do Paço, durante o qual o Prof. José Empis, que desempenhou várias funções na European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS), incluindo a de tesoureiro, recebeu das mãos do Prof. Francesco de Angelis a medalha de honra daquela associação. Na mesma ocasião, o Prof. Wolfram Koch, Diretor Executivo da Sociedade Alemã de Química (Gesellschaft Deutscher Chemiker), entregou ao Presidente da SPQ uma

missiva de felicitações da GDCh pelo centenário. Este recebeu também, da Wiley-VCH, na pessoa da Vice-Presidente e Diretora Executiva para a Química, Dr<sup>a</sup> Eva Wille, quatro volumes contendo todos os artigos publicados por portugueses nas revistas do consórcio (cerca de 500), desde o início, em 1998. Estes representam 1,3% do total dos artigos publicados no mesmo período nas revistas do consórcio (as percentagens oscilam entre 2,4% no

EurJIC e 0,51% no ChemSusChem). Como se vê no gráfico, a contribuição nacional tem vindo a aumentar, em termos absolutos, mas está muito abaixo do que poderia ser (o ISI registou, em 2011, cerca de 1600 publicações em Química de autores com endereço português).

**Mário Berberan e Santos**  
(berberan@ist.utl.pt)  
Presidente da SPQ



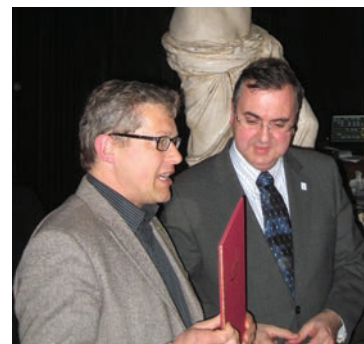
Publicações portuguesas em revistas CPSE



Aspetto dos trabalhos da reunião de Lisboa



Francesco de Angelis entrega a José Empis o diploma e a medalha de honra da EuCheMS



Wolfram Koch, diretor executivo da Sociedade Alemã de Química, entrega a Mário Berberan e Santos uma missiva de felicitações da GDCh pelo centenário da SPQ





Foto em cima: o Presidente da SPQ, juntamente com os colegas da Wiley-VCH, segurando quatro volumes com quase 500 artigos de autores nacionais. Da esquerda para a direita: Neville Compton (editor de Chemistry - A European Journal), Mário Berberan e Santos (SPQ), Peter Goelitz (Vice-Presidente e Diretor de Publicações, Editor de Angewandte Chemie), Eva Wille (Vice-Presidente e diretora Executiva para a Química) e Karen Hindson (Editora Coordenadora do CPSE). Imagem à direita: primeira página do primeiro volume



Spring 2012

Dear Sociedade Portuguesa de Química,  
dear Professor Berberan-Santos, dear Mário,

Many congratulations on the "100 Anos" of your society from the Editorial Offices of Wiley-VCH, Chemistry Journals. We would like to take this opportunity to thank you and all the society members for all contributions from Portugal that have made the "ChemPubSoc Europe (CPSE) venture" so successful. Important negotiations regarding the *European Journal of Inorganic Chemistry* and the *European Journal of Organic Chemistry* even carry the name "Lisbon Agreement"!

It has always been a pleasure and very stimulating to work with your society and their representatives José Artur de Sousa Martinho Simões, João Rocha, José Manuel Martinho and now Mário Nuno de Matos Sequeira Berberan e Santos. Members of your society also play leading roles in our joint CPSE journals – João Rocha is presently chairman of the Editorial Board of the *European Journal of Inorganic Chemistry*.

On the occasion of your "100 Anos" we would like to document the chemistry of Portugal as published in CPSE journals between 1998 – the start of our joint venture – and February 2012. We are happy to present you with these four volumes comprising 480 contributions, 21 cover pictures from eight journals as well as the e-magazine ChemViews. You can be justly proud of the achievement documented here.

We look forward to continuing the journey together in chemistry and publishing and wish you all the best for the future.

Cordially, with best regards also from Neville Compton (Chemistry – A European Journal), Greta Heydenrych (ChemPhysChem), Guido Kemeling (ChemSusChem), Vera Köster (ChemistryViews), Natalia Ortúzar (ChemMedChem), Haymo Ross (European Journal of Organic Chemistry) and Monika Sitz (Marketing).



Eva E. Wille  
VP & Executive Director



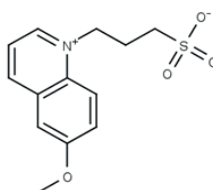
Karen Hindson  
Coordinating Editor  
CPSE Journals



Peter Göllitz  
VP & Publishing Director

## UMA MOLÉCULA CHAMADA SPQ

Num universo de algumas dezenas de milhões de moléculas conhecidas, era de esperar que existisse uma, cuja designação comum através de uma sigla de 3 letras fosse SPQ. E assim acontece realmente desde 1982, graças a Wolfbeis e a Urbano (veja-se Bregestovski, Waseem e Mukhtarov, Genetically encoded optical sensors for monitoring of intracellular chloride and chloride-selective channel activity, *Frontiers in Molecular Neuroscience* 2 (2009) 1, e referências aí citadas), como descobriu há pouco, por acaso, a Sociedade Portuguesa de Química. Trata-se do 6-metoxi-*N*-(3-sulfonato-propil)quinolínio, ou SPQ, molécula usada como sensor fluorescente de halogenetos (cloreto, brometo e iodeto), o que quer a Divisão de Química



Analítica, quer o Grupo de Fotoquímica, verão certamente com bons olhos.

Como é uma molécula orgânica usada para medir concentrações de iões inorgânicos em meios biológicos por um método espectroscópico, também é certamente relevante para as Divisões de Química Orgânica, Inorgânica, Química-Física e de Ciências da Vida.

Por coincidência, a emissão de fluorescência desta molécula dá-se no

azul (máximo a 450 nm), que é, como se sabe, a cor da SPQ. Talvez o leitor conheça outras moléculas com nomes comuns curiosos que queira partilhar.

Sem entrar em pormenores, a SPQ verificou, por exemplo, que há moléculas cujas siglas coincidem com as de partidos políticos nacionais, clubes de futebol, etc.

Quanto a estes últimos, e pelo menos num caso, cuja identificação se deixa como passatempo aos respectivos aficionados, trata-se mesmo da fórmula de uma molécula triatómica!

**Mário Berberan e Santos**  
(berberan@ist.utl.pt)



PROJETOS EDITORIAIS DE QUÍMICA PARA 2012/2013

Na sequência do apresentado nos últimos anos, voltamos a divulgar os projetos editoriais a adotar, para vigorarem por um período de seis anos, a partir do início do ano letivo 2012/2013, na disciplina de Ciências Físico-Químicas do 7.º Ano.

AREAL EDITORES

“Laboratorium 7” (ISBN 978-989-647-351-8) Autores: André Costa, Cristina Moura Antunes e Falhas Ferreira.



“Zoom 7 (Terra no Espaço e Terra em Transformação)” (ISBN 978-989-647-377-8) Autores: António José Silva, Cláudia Simões, Fernanda Resende e Manuela Ribeiro.



EDIÇÕES ASA

“Novo FQ 7” (ISBN 978-989-23-1888-2) Autores: M. Neli Cavaleiro e M. Domingas Beleza.



PORTO EDITORA

“À Descoberta do Planeta Azul (em 2 partes)” (ISBN 978-972-0-32861-8) Autores: Noémia Maciel e Carlos Alberto Duarte.

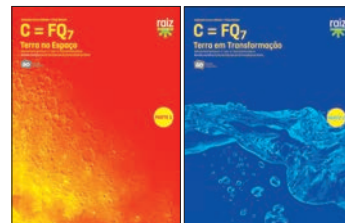


“Explora” (ISBN 978-972-0-32834-2) Autores: Duarte Januário, Eliana Correia e Ângelo Castro.



RAIZ EDITORA

“C = FQ<sub>7</sub> (Terra no Espaço e Terra em Transformação)” (978-972-680-874-9) Autores: Adelaide Rebelo e Filipe Rebelo.



SANTILLANA-CONSTÂNCIA

“Projeto Desafios Ciências Físico-Químicas” (978 989 708 136 1) Autores: Francisca Lopes, Isabel Pires e Sandra Ribeiro.

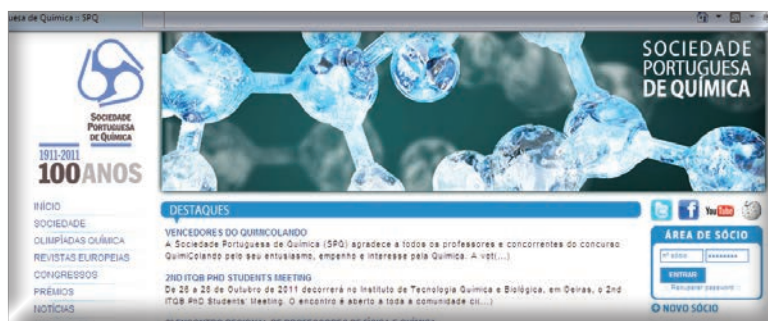


TEXTO EDITORES

“Universo FQ” (978-972-47-4719-4) Autores: Carlos Fiolhais, Manuel Fiolhais, Victor Gil, João Paiva, Carla Moraes e Sandra Costa.



Informação compilada por Carlos Folhadela (bquimica@ipb.pt) www.spq.pt



Viste a nossa homepage em: [www.spq.pt](http://www.spq.pt)



# Five Years of Outstanding Publications



Impact Factor\*:  
**3.306**

\*2010 Journal Citation Reports®  
(Thomson Reuters, 2011)

[www.chemmedchem.org](http://www.chemmedchem.org)

**WILEY**  
ONLINE LIBRARY

**WILEY-VCH**

## Chemistry Enabling Drug Discovery

*ChemMedChem* is a top journal for research at the interface of chemistry, biology and medicine.

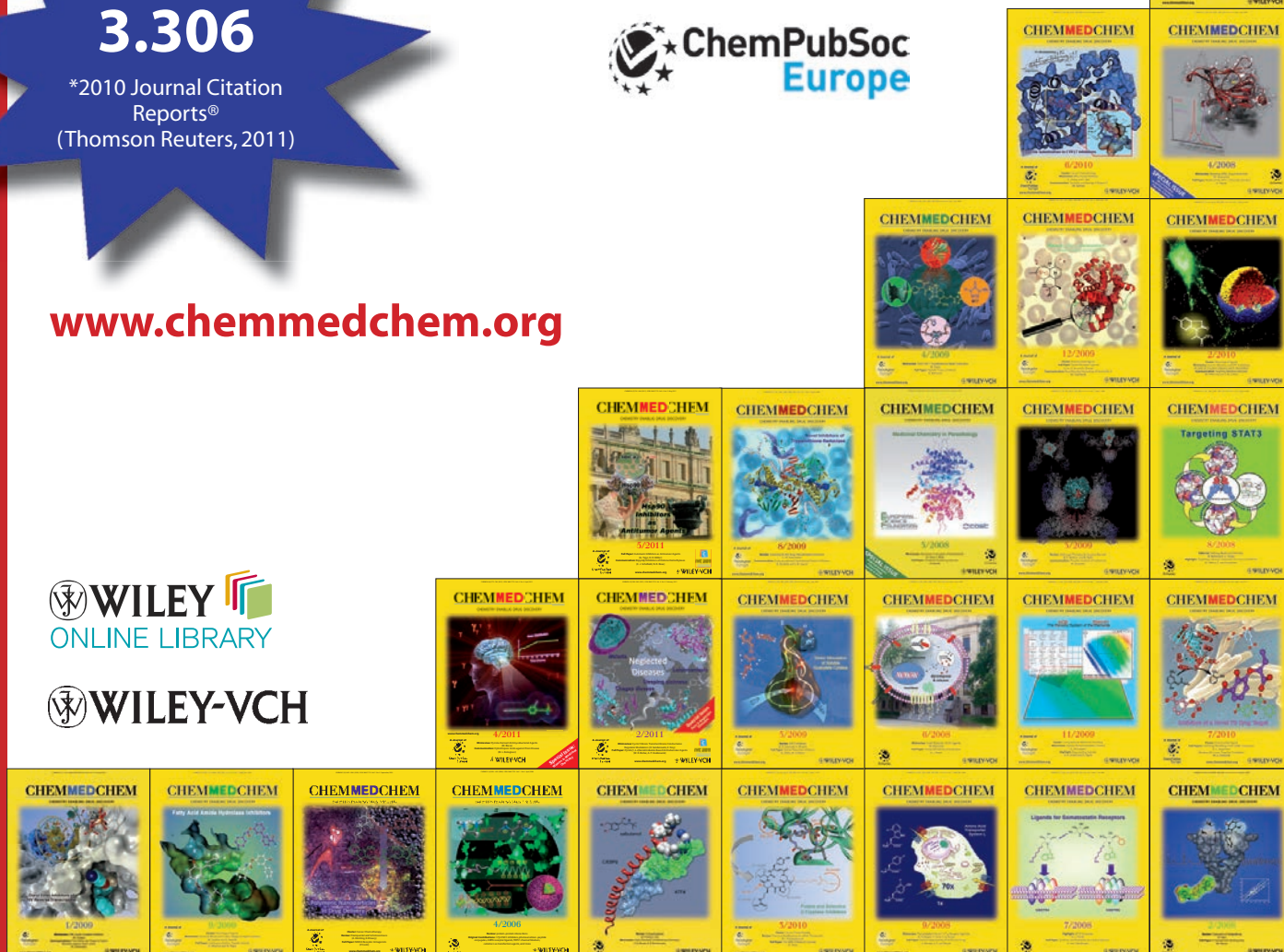
The journal publishes an attractive mix of:

- Full Papers and Communications
- Reviews and Minireviews
- Highlights and Concepts
- Book and Multimedia Reviews

*ChemMedChem* is

- co-owned by ChemPubSoc Europe
- covered in many databases including MEDLINE
- a sister journal of *Angewandte Chemie*

**ChemPubSoc Europe**





# MANUAL DE TRABALHOS LABORATORIAIS DE QUÍMICA ORGÂNICA E FARMACÊUTICA



M. MATILDE MARQUES\*

Coordenação: Madalena M. M. Pinto

Editora: Lidel – Edições Técnicas, Lda

N.º páginas: 484 \* ISBN: 978-972-757-750-7

O presente volume é fruto da experiência pedagógica de um grupo de docentes do Laboratório de Química Orgânica e Farmacêutica da Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto. Está claramente pensado como suporte à componente experimental de cursos universitários das áreas de Química Farmacêutica e Medicinal, embora seja de inegável utilidade em cursos introdutórios de Técnicas Laboratoriais e de Química Orgânica. Poderá também servir como obra de apoio a professores do ensino secundário das áreas de Química e Ciências da Saúde, que frequentemente se deparam com a escassez de material adequado em língua portuguesa.

Uma componente substancial da obra é dedicada à apresentação dos critérios básicos de pureza de compostos orgânicos (pontos de fusão e ebulição, espectro de infravermelho em comparação com o de um padrão, cromatografia analítica, índice de refração, densidade e rotação específica), processos de purificação (extração, destilação, sublimação, cristalização e cromatografia) e critérios de identificação de substâncias orgânicas (desde

a análise elementar à identificação de grupos funcionais e à caracterização estrutural por via espectroscópica, com ênfase em ultravioleta-visível, infravermelho, ressonância magnética nuclear e espectrometria de massa). Os protocolos experimentais propostos são antecedidos de textos introdutórios, necessariamente sucintos, complementando-se a informação no fim de cada subcapítulo com referências bibliográficas adequadas. São de louvar a inclusão de um subcapítulo sobre extração em fase sólida, frequentemente ausente de manuais de laboratório clássicos, bem como a inclusão de informação relativa aos fundamentos da cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) e da cromatografia gasosa.

Na segunda parte do manual são propostos vários trabalhos laboratoriais essencialmente orientados para Química Farmacêutica. Os protocolos são geralmente simples mas selecionados de modo criterioso para utilizar as técnicas de separação e análise introduzidas na primeira parte. O foco centra-se na síntese, isolamento, análise e doseamento de substâncias biologicamente ativas. Aplauda-se a inclusão de um conjunto de protocolos

de natureza inovadora em manuais deste tipo, que abordam conceitos frequentemente tratados a nível teórico em cursos de Química Medicinal, mas raramente ilustrados experimentalmente. Estão neste caso, por exemplo, a determinação de coeficientes de partição e a sua utilização para obter constantes lipofílicas de substituintes, a utilização de modelos químicos para avaliar a influência do pH na absorção de fármacos, a abordagem experimental ao conceito de reconhecimento molecular (essencial nas interações ligando-recetor) e a introdução ao planeamento de fármacos assistido por computador.

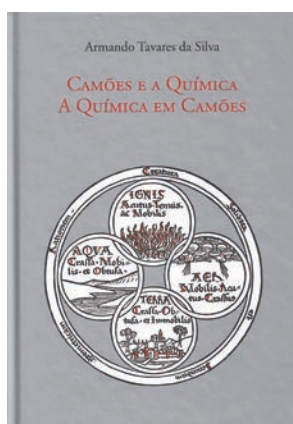
O livro é completado com um conjunto de anexos úteis, incluindo normas gerais e procedimentos de segurança, generalidades sobre material de laboratório e estrutura das farmacopeias. A consulta é fácil, a informação fornecida é correta e equilibrada e a qualidade gráfica é excelente. Em resumo, trata-se de um manual de qualidade, com aspetos inovadores, cujo sucesso se antecipa junto de docentes e alunos de Química Orgânica e Farmacêutica em Portugal e (se adequadamente divulgado) em países lusófonos.

\* Departamento de Engenharia Química  
Instituto Superior Técnico  
E-mail: matilde.marques@ist.utl.pt



SPQ - Há 100 anos a divulgar a Química em Portugal  
Viste a nossa homepage em [www.spq.pt](http://www.spq.pt) e esteja sempre atualizado  
Torne-se sócio e usufrua de muitos benefícios

## CAMÕES E A QUÍMICA. A QUÍMICA EM CAMÕES



JOSÉ ARTUR MARTINHO SIMÕES\*

Autor: Armando Tavares da Silva

Edição do autor

ISBN: 978-989-202-085-3

Armando Tavares da Silva doutorou-se em Engenharia Química pela Universidade de Cambridge (Reino Unido), em 1967. Foi docente do Instituto Superior Técnico e Professor Catedrático na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra. Aposentado em 2002, dedica-se à investigação histórica.

Como é salientado pelo autor, são escassos os documentos seguros que permitam reconstruir a biografia de Camões. A incerteza inclui até o ano e lugar do seu nascimento. No livro em causa aprende-se que a data de nascimento oficialmente aceite (1524) é refutada por alguns historiadores, que apontam o ano de 1531 como sendo o mais provável. Ora se muito pouco se conhece da vida de Camões, menos se sabe sobre o seu interesse pela Química – ou, melhor dizendo, pela alquimia, uma vez que só no século XVIII se começou a racionalizar o conhecimento químico. É também impossível saber

se Camões conheceu algumas obras cujo conteúdo se situava no âmbito da futura ciência química, como o *De re metallica*, de Georgius Agricola.

Por outro lado, analisando a obra do poeta, já é possível aprender qual a *Química em Camões*. Foi essa análise que o Prof. Tavares da Silva fez. N'Os *Lusíadas*, vemos que Camões menciona ferro, cobre, estanho, ouro e prata. Mas, no século XVI, ainda em pleno Renascimento, a “química” era dominada pelos elementos dos gregos – fogo, ar, água e terra. Camões menciona-os não apenas n'Os *Lusíadas* mas também na sua obra lírica. Para aguçar o apetite do leitor transcrevo abaixo um dos seus sonetos.

Foi um prazer (embora breve!) ler o livro do Prof. Tavares da Silva, e ver/rever uma seleção iconográfica, também apresentada no livro, sobre a Química na literatura científica e na arte entre 1530 e 1671.

*Ar, que de meus suspiros vejo cheio,  
Terra, cansada já com meu tormento,  
Água, que com mil lágrimas sustento,  
Fogo, que mais acendo no meu seio:*

*Em paz estais em mim, e assim o creio,  
Sem esse ser o vosso próprio intento,  
Pois em dor onde falta sofrimento,  
A vida se sustém por vosso meio.*

*Ai, imiga Fortuna! Ai, vingativo  
Amor! A que discursos por vós tenho,  
Sem nunca vos mover com minha mágua!*

*Se me quereis matar, para que vivo?  
E como vivo, se contrários tenho  
Amor, Fortuna, Ar, Terra, Fogo e  
Água?*

\* Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
E-mail: jamsimoes@fc.ul.pt

## Vá a [www.spq.pt](http://www.spq.pt)

Torne-se Sócio da Sociedade Portuguesa de Química e beneficie de:

- Pertencer a uma comunidade científica dinâmica;
- Receber o boletim “QUÍMICA”;
- Descontos nos Encontros promovidos pela SPQ;
- Descontos nas publicações da SPQ;
- Protocolos assinados entre a SPQ e outras entidades;
- Participar na promoção da Química;
- Apoiar uma Sociedade Científica.

# QUASE POESIA QUASE QUÍMICA

JOÃO C. PAIVA\*

Eu não sou poeta!

Mas sou poeta porque todos somos poetas.

Se me perguntarem porque escrevo poesia responderei pronto, como respondendo a algumas perguntas de química: não sei mas vou querer saber...

Nos versos escorre algo que a caneta diz por mim, que não conheço bem, que desejo exprimir mas não saberia como sem esse caldo de letras no papel.

A química e a poesia são mundos diferentes mas já mereceram ensaios geniais, como os de Rómulo de Carvalho, que nos inspira...

Tenho a oportunidade de publicar em formato de e-book uma coletânea de trinta e quatro poemas intitulados “quase poesia quase química”, que estará disponível on line em [www.spq.publicacoes/poesia](http://www.spq.publicacoes/poesia) e em [www.poesia.jcpaiva.net](http://www.poesia.jcpaiva.net). A edição digital tem vantagens de acessibilidade e ecologia que me atraem.

Agradeço à Sociedade Portuguesa de Química o apoio desta publicação, no âmbito do seu centésimo centenário.

Agradeço ainda as preciosas sugestões de vários colegas, em particular os exercícios escritos abaixo, dos amigos Víctor Gil, Raquel Gonçalves-Maia e Graça Miguel.

Se um só dos versos, que por mim alguém escreve, tocasse um coração, fascinasse para a química e encantasse para a química da vida um sopro de brisa, isso seria para mim uma dádiva.

## ALGUNS POEMAS DA COLETÂNEA

### Dose certa

*Procuro a  
minha dose.  
Quanto sou?  
Que espaço ocupo?  
Que tempo tomo?  
Às vezes, sou demais,  
quase veneno.  
Encho com excessivas  
palavras.  
Melhor fora ser  
silencioso solvente.  
Outras vezes  
devia ser mais presente.  
Mais soluto.  
Mais concentrado.  
Sou micro-escala  
quando deveria  
gritar ao mundo  
toda a injustiça.  
Meu sonho?  
Ser tónico, não tóxico.  
Procuro a  
minha dose,  
a dose certa...*



### Eletrão

*Tantas voltas  
quânticas  
sem saber  
nunca  
onde estás?  
(como eu).  
Se te agarram  
deixas de dar-te  
a conhecer  
(como eu).*



*Se te olham  
ficas rubro  
e deixas de ser  
o que eras  
(como eu).  
Precisas de muitos  
iguais para  
te significar  
(como eu).  
Com teus pares  
podes dar  
luz  
como eu...*

### Alquimia

*De tempos  
antigos  
à noite  
ou de dia  
caverna escondida  
segredo,  
alquimia.  
Entre ferro  
e engenho  
um qualquer  
vil metal,  
sai o sonho  
tamanho,  
pedra  
filosofal.  
Sai ouro  
e mistério,  
receitas  
à sorte  
elixir  
milagroso,  
corte eterno  
da morte...*



\* Centro de Investigação em Química, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto  
Rua do Campo Alegre, 687, 4169-007 Porto  
E-mail: [jcpaiva@fc.up.pt](mailto:jcpaiva@fc.up.pt)



## Recomeço

*Cresce desordem,  
desinformação.*

*Perdido,  
então,  
sustido,  
parado  
na segunda lei.*

*No equilíbrio,  
bem sei,  
a energia livre  
não varia.*

*E o tempo anda  
até um dia.*

*E eu espero  
e desespero.*

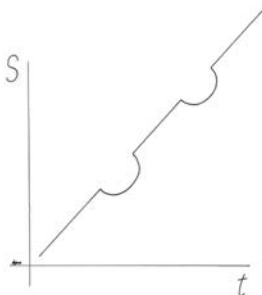
*E o acaso?*

*Haverá sorte?*

*A dúvida  
não é morte.*

*Morrer  
é entropia  
congelada.*

*E a vida,  
agitada,  
quem diria,  
é incerta  
mas aberta  
à alegria.*



## OPINIÕES

O uso de “quase” neste título, repetido embora não como um “quase-quase”, poderia, à partida, ter pelo menos duas leituras. Uma seria uma declaração de humildade do autor, quer face à criação poética, quer ao saber e à criação científica. A outra seria a promessa de uma mistura homogênea – ou, mesmo, de uma combinação – fecunda entre Química e Poesia, em que, numa imaginativa fertilização cruzada, as partes se diluem no todo.

É a segunda interpretação que, fundamentalmente, eu perfilho, porventura temperada com uma pitada da primeira: alguma modéstia quanto se trata de ter (mais) um químico reconhecido a “pentear a foice por seara alheia”. Por fertilização cruzada entendo, aqui, a importância da Poesia na comunica-

ção da Ciência, assim como – o principal objetivo desta obra, creio – o uso da Ciência na construção da emoção estética, designadamente, através da metáfora.

Como despretenciosamente escrito noutra lugar (*Poesia & Ciência: implicações para a educação formal e não formal em Ciência*, Victor M.S. Gil e M. Cristina Pinheiro, coleção Ciência & C<sup>a</sup>, Exploratório Ciência Viva, 2011), podem identificar-se diversos tipos de cruzamentos da Poesia com a Ciência, desde os que são centrados na história, natureza e papel da Ciência, até à relação com áreas científicas específicas (Física, Química, Biologia, ...). Nestes casos temos normalmente a exploração da Ciência, com a sua linguagem própria, em prol do poema, quer como analogia – ou, mesmo, metáfora –, quer tirando partido de palavras com duplo sentido na vida e na Ciência, quer, simplesmente, apresentando Ciência em formato próprio da Poesia – com mera dimensão descritiva – ou, no extremo oposto, integrando verdadeiramente o registo científico na agenda poética com mais valia: emoção, protesto, mensagem, testemunho e reflexão.

É possível encontrar exemplos de todas estas intersecções nos poemas em análise, intencionalmente com títulos que têm origem na Química – vocabulos e expressões da Química (Carbonos, Eletrão, Densidade, Mesmo DNA, Hidrogénio, Tabela Periódica, Espectro, Reação, Titulada, Reduzido...) – e outros com ela relacionados (Na Dose Certa, Eu e a Química, Ironia ao Natural, ...). A principal exceção é o último que coloca lado a lado as duas manifestações da criatividade humana em causa: “Ciência ou Poesia”.

- Em “Na dose certa”, há termos de duplo sentido, como “concentrado” e há a metáfora do tóxico e do tónico na procura da dose certa a favor da relação com o outro e em prol da justiça.
- Em “Eu e a Química”, explora-se a analogia entre a Química, ciência das “coisas próprias” e das suas transformações, e a essência do autor que deseja valer pelo que faz e transforma no mundo à sua volta e em si mesmo.

- Em “Carbonos”, encontra-se sobretudo uma descrição esquemática, em formato poético, com abundante utilização de nomes de espécies químicas e uma alusão (para muitos enigmática, as 4 patas) à tetravalência do carbono, elemento central e vital, nas diversas situações em que ocorre (daí o plural “carbonos”).
- Em “Decaimento”, a referência ao decaimento radioativo, à meia-vida e à radiação, faz ponte com os que já passaram ao mundo da memória mas ainda nos influenciam, para deixar a mensagem de que há um sentido escondido da vida compatível com o aleatório.
- Em “A Química em b por v”, a paródia à pronúncia do norte mostra que a Química se pode revelar a todos: o que é preciso é que se veja bem ...ou “beja vem”.
- Em “A Química e a pressa”, explora-se uma analogia com a Cinética Química (catalisar, mecanismo, ativação, barreira) para deixar uma mensagem de que a pressa é o pecado do mundo atual, não deixando espaço para amar, contemplar, confiar ... escorregar feliz.
- Em “Densidade”, pode falar-se de uma metáfora entre objeto denso – mais centrado em si mesmo – e egocentrismo – ambos afundam – num protesto contra o egoísmo.
- Em “Carbono-lição”, uma analogia entre a Química do carbono, com as suas ligações variadas, e a importância das nossas interações com os outros, ainda que diversas e de diferentes durações.
- Em “Alquimia”, uma descrição ritmada dos sonhos secretos dos alquimistas (pedra filosofal, elixir da longa vida).
- Em “Enxofre”, uma descrição ritmada de um pouco da Química do enxofre (chuvas ácidas, ...) com um breve toque final quase romântico (penteado e ligações de enxofre).
- Em “Mesmo DNA”, um breve convite à fraternidade.
- Em “Solução”, palavra de duplo sentido, aquecer em cadinho é a metáfora para procurar a compreensão do mundo, quando, afinal, só se encontra o caminho e não a solução.
- Em “Hélio”, a metáfora das ligações frágeis e ocasionais, de pouco comprometimento, tal como os átomos de hélio.

- Em “Segunda lei”, a desordem em Física e na vida não é incompatível com a ordem e a harmonia.
- Em “Ironia ao que é natural”, uma breve mensagem educativa: nem tudo o que é natural é bom, nem tudo o que não é natural é mau. Ironia: a aspirina, o perfume, o plástico de uma válvula cardíaca.
- Em “Oxigénio”, átomos que já pertenceram a outros seres humanos, como convite à união entre seres humanos.
- Em “Da Química”, “Recomeço”, “Transformação”, “Cor”, “Hidrogénio”, descrições químicas com analogias.
- Em “Sal da terra”, a metáfora do autor como sal que tempera e se confunde em solução.
- Em “Cálculos de amor”, a mensagem de que dividir amor é ... multiplicar.
- Em “Laboratório químico”, uma descrição das operações em laboratório em formato poético que exige atenção e ... emoção.
- Em “Cobre”, uma descrição ritmada com fim humorístico.
- Em “Tabela Periódica”, uma descrição ritmada de uma tabela que resume o mundo.
- Em “Titulada”, uma descrição química como base de uma subtil metáfora: sabendo titulante, sabe-se titulado.
- Em “Futeboleno”, a descrição ritmada de uma curiosa substância recente.
- Em “Reduzido”, uma descrição de transferência de eletrões em analogia com dar e receber.
- Em “Espectro”, essencialmente uma descrição ritmada da origem dos espectros, sendo que o melhor espectro de gente é ... o sorriso.
- Em “Hino à Química”, um anagrama com adjetivação da Química, exceto na ironia do último verso: Alquimia.
- Em “Reação”, outra vez a ideia de que o poeta deseja transformar-se, como em Química, para ser melhor.
- Em “Ciência ou Poesia”, um dilema em que rigor é associado a uma e emoção a outra.

Temos, assim, variadas mensagens fortes avançadas pelo autor a favor da transformação própria para se ser melhor, de que há um sentido da vida

(apesar dos caos), de que a compreensão é apenas um caminho, da relação fraternal com os outros, da atuação individual, como o sal que tempera, da necessidade de pausa para se ser feliz, ...

Tudo isto, várias vezes através da analogia e, mesmo, da metáfora, sempre que a analogia surge como imperativo estético.

O humor também não está ausente, aflorando em vários exemplos.

Frequentes são aspetos da Química tratados em formato ritmado próprio de poema, em que a dimensão é essencialmente descritiva.

Numa nota menos positiva, não posso deixar de reconhecer algumas passagens menos conseguidas, em minha opinião, designadamente por não lhes encontrar suficiente dimensão poética. Mas pode ser falta minha ...

Finalmente, a escolha de “Ciência ou Poesia” para último poema é certamente acertada, reconhecendo-se o prazer na cultura de ambas, embora se me afigure que há alguma simplificação em identificar Ciência com rigor e Poesia com emoção. Por um lado, há prazer mas há, também, trabalho. Por outro, há quem defenda que “a emoção estética é comum à descoberta científica e à criação artística: admira primeiro, compreenderás depois” (G. Bachelard). No entanto, embora tratando-se, em ambos os casos, de uma aventura intelectual de raiz abstrata, em que a imaginação e a criatividade desempenham o papel central, de mãos dadas com a emoção, pode contrastar-se a perenidade da obra poética (e da obra artística, em geral) com a precariedade de muitas construções científicas ao longo dos tempos.

Mesmo a terminar, um comentário sobre a personalidade do autor enquanto se manifesta nestas obras. Aqui se reconhecem declaradas e conhecidas preocupações de natureza social, ética e filosófica. Mas não deixa de ser curioso que a exuberância com que, habitualmente, converte uma ideia que considere interessante em ação – seja ela de natureza prática ou de co-

municação com terceiros – dá lugar, nestes poemas, a uma abordagem estilizada, quase esquemática. Um mecanismo de compensação face a “encho com excessivas palavras” do primeiro poema “Na dose certa”?

**Victor Gil**

Exploratório Infante D. Henrique

São vários os caminhos para se chegar – e se fazer chegar – à Química. E variados os caminhos que conduzem à sua integração na cultura universal. João Paiva escolheu a “quase poesia” para nos transportar até à “quase química”. E fê-lo com a simplicidade que é exigida por um apuramento de estilo tão caro à Ciência quanto à Poesia.

O primeiro poema, *Dose certa*, revela-nos desde logo o autor, as suas potencialidades e preocupações. A dose que se move entre o tempo e o espaço, as palavras e o silêncio, a presença e a ausência, a dose que grita contra as injustiças do mundo é metaforicamente interpretada pelas relações soluto-solvente, tónico-tóxico, micro- e macro-escala.

Apreciei *Carbono*, delirante, vital, quase animal; admirei *Mesmo DNA* e a sua urgência de fraternidade; contemplei a magia de *Solução* e o seu bonito jogo de palavras onde a Química (tal como a Poesia) saem consolidadas; sorri à *Ironia ao natural*, colorida e enganadora como um demónio; li e reli, com fascínio, *Futeboleno*.

Mais oferece o autor, que nos alimenta e se alimenta destas metamorfoses de escrita. Leva no bolso, ele assim o diz, Ciência e Poesia. E, em fórmulas de luz, numa embrulha a outra com sedução e mestria.

Uma palavra ainda para as ilustrações, tão singelas e virtuosas quanto elucidativas, a correlacionarem-se muito bem com a textura poética.

**Raquel Gonçalves-Maia**

Universidade de Lisboa

“Quase Poesia Quase Química”, de João Paiva, é um conjunto de poemas que glorificam a Poesia da Química e, enquanto poesia, constituem uma permanente interrogação sobre o próprio Homem e o seu contexto cósmico.

A dualidade reflexão-resistência, conhecimento-palavra, mente-matéria, homem-molécula, encontra-se em permanente voo, sereno ou impetuoso, no excelentíssimo trabalho e expressão de célebres cientistas, químicos e professores, como António Gedeão e Roald Hoffmann.

Se, por um lado, e homenageando os cem anos da Sociedade Portuguesa de Química e de seus fazedores, esta coletânea pode ser encarada como uma inspiração pedagógica, num encontro alternativo com o aluno e num simultâneo apelo à criatividade e imaginação, por outro, a busca do ensinador vai mais além.

Num impulso mais extenso, o autor evoca-nos a questão paradoxal da infinita essencialidade e da existencialidade-limite, numa profusa ligação en-

tre química e eu íntimo. Esta intimidade e beleza parecem, em grande parte, nascer desta inequívoca aliança.

Sem austeridade formal, estes poemas testemunham a fidelidade do poeta a algumas preocupações permanentes: certeza e incerteza; o quântico e o infinitamente grande; espaço e tempo; o caos e a harmonia; o visível e o invisível; emotividade e a sua contenção.

E assim, o poeta-químico, homem-molécula, no seu questionamento, transfigura-se em eletrão, em metal, em transformação, em entropia, em dissolução.

Poder-se-á dizer que no seu conjunto esta poética revela um certo estado de rutura de estruturas cristalinas... (*"The Metamict State"*, R. H.) na sua

interpelação consciente, desamparada, e perturbante.

Perceciona-se ainda na sua densidade reflexiva, uma mutação continuada, tangencialmente intransponível, englobante da ciência, da palavra escrita, da humanidade, da religião. Contudo, se o desamparo intersticial é claro, o autor parece encontrar o seu contrário na esperança ... vinda ... da ciência? do cósmico? da crença?

Como o poema incorpora não apenas o próprio poeta, na sua condição humana e universal, mas essencialmente o leitor, é a ele que convidamos a interrogar-se, a conhecer-se, através do infinitamente pequeno, dos átomos e das moléculas.

**Maria da Graça Miguel**  
Universidade de Coimbra

## ATUALIDADE CIENTÍFICA

### UMA NOVA CLASSE DE SUPERBASES

Investigadores dos EUA descobrem que as ciclopropeniminas podem ser usadas como "superbases" altamente eficazes em processos de organocatálise enantioselectiva (*J. Am. Chem. Soc.*, DOI: 10.1021/ja3015764). Estes resultados poderão conduzir ao desenvolvimento mais rápido e fácil de novos compostos quirais com aplicações farmacêuticas, entre outras.

Recentemente, foram desenvolvidos diversos tipos de bases orgânicas para a catálise enantioselectiva de reações de transferência de prótons para a obtenção de produtos opticamente ativos. O trabalho focou-se essencialmente nas amidinas e guanidinas quirais.

No entanto, estes compostos apresentam uma basicidade limitada e baixo poder catalítico. Agora, Jeffrey S. Bandar e o professor Tristan H. Lambert da Columbia University demonstram que os compostos 2,3-bis(dialquilamino)ciclopropeniminas, caracterizados por elevada basicidade, revelam-se como organocatalisadores quirais de eficácia muito superior.

Os iões ciclopropénio, formas protonadas das bases catalíticas, correspondem a aromáticos estabilizados por ressonância, que tornam as ciclopropeniminas altamente básicas. Assim, a basicidade das ciclopropeniminas é 3,5 ordens de magnitude mais elevada do que as guanidinas comparáveis, catalisando as reações com velocidades até 800 vezes superiores.

Bandar e Lambert usam uma diciclohexil-ciclopropenimina num procedimento à escala preparativa para catalisar uma adição de Michael, obtendo 25 g de produto com uma enantioselectividade de 99%.

Assim, reportam a síntese do catalisador a partir de matérias-primas baratas e acessíveis, a obtenção de uma estrutura de Raios X da versão protonada, e a proposta de um mecanismo para a reação catalisada.

Choon-Hong Tan da National University of Singapore afirma que os novos catalisadores "são fáceis de produzir e o seu scale-up é possível, para além das condições reacionais serem relativamente suaves". Acrescenta ainda que "a sua alta basicidade deve possibilitar a catálise de uma vasta gama de reações, nomeadamente as que produzem componentes farmacêuticos quirais ativos".

Por outro lado, Henk Hiemstra da University of Amsterdam questiona se os catalisadores funcionarão tão bem para outras reações. Todavia, frisa a sua admiração pela facilidade com que os catalisadores são sintetizados e pelo seu manifesto bom desempenho. Assim, afirma que "a descoberta pode levar à continuação de um considerável trabalho de pesquisa em torno deste tipo de catalisadores".

(adaptado do artigo de 02/04/2012 de Stu Borman: New Class of Superbases, Chemical & Engineering News – <http://cen.acs.org/articles/90/i14/New-Class-Superbases.html>)

**Paulo Brito** (paulo@ipb.pt)  
Instituto Politécnico de Bragança



## PEQUENAS MOLÉCULAS SULFATADAS: AO SERVIÇO DO CORAÇÃO

MARTA CORREIA DA SILVA\*

O impacto que as doenças cardiovasculares têm na saúde pública pode bem ser traduzido pelos 17,3 milhões de mortes por ano, correspondendo à principal causa de morte a nível mundial. Considerando os dados da Organização Mundial de Saúde, que estima que em 2030 este número atingirá os 23,6 milhões, é fácil de pressupor que a investigação nesta área seja de extrema relevância. Embora existam substâncias úteis na terapêutica, há muito a fazer no sentido de se obterem agentes mais eficazes e com menos efeitos secundários. Assim, o trabalho da minha tese de doutoramento consistiu no desenvolvimento de pequenas moléculas como novos agentes antitrombóticos e no estudo do seu potencial como futuras alternativas à terapêutica, dando assim uma contribuição para a resolução desta problemática.

### HEMOSTASE: O CANALIZADOR

O sangue possui propriedades fascinantes. Uma das mais curiosas é a sua capacidade de coagular quando há uma rutura vascular. É como se a água das nossas casas fosse capaz de reparar os furos que surgem na canalização que a conduz às torneiras. A hemostase é o nome que se dá a este mecanismo de defesa que, em caso de lesão, permite que os tecidos sejam reparados impedindo a perda excessiva de sangue, comportando-se como um “canalizador”! Este fenómeno, que depende de interações complexas entre a parede dos vasos, as plaquetas, as enzimas e os cofatores, é regulado por diferentes mecanismos que incluem várias fases: constrição do vaso lesado, formação do trombo plaquetário, formação do coágulo de fibrina (coagulação), seguida pela dissolução do coágulo (fibrinólise). Existem vários reguladores do sistema hemostático. A antitrombina III (ATIII) é a principal “controladora” da coagulação. É inibidora de vários fatores intervenientes na coagulação, mais especialmente do fator Xa (FXa) e do fator IIa (FIIa).

Desequilíbrios no sistema hemostático conduzirão a situações patológicas de trombose ou de hemorragia. Cerca

de 90% das doenças cardiovasculares são causadas por eventos trombóticos e 10% causadas por eventos hemorrágicos. O que pode ser feito para prevenir e tratar os eventos trombóticos? Geralmente, no caso da trombose que ocorre nas artérias (trombose arterial), onde o sangue é rico em plaquetas, são utilizados agentes antiagregantes plaquetários. No caso da trombose que ocorre nas veias (trombose venosa), onde o sangue é pobre em plaquetas, são utilizados agentes anticoagulantes. No entanto, muitas vezes, é necessária a sua utilização conjunta.

### TERAPÊUTICA ANTITROMBÓTICA: O TAMANHO CONTA?

A terapêutica anticoagulante é caracterizada principalmente pela utilização de açúcares sulfatados: a heparina, as heparinas de baixo peso molecular (HBPM) e o fondaparinux (Figura 1). A heparina exerce a sua ação por se ligar à ATIII e acelerar a sua atividade inibidora do FXa e do FIIa, cerca de 1000 vezes. A heparina comercializada é um produto natural, de fonte bovina ou porcina. A origem animal da heparina acrescenta preocupações relativas a variabilidade estrutural e, conseqüentemente, de efeito biológico, bem como de possível contaminação com patógenos animais. Por outro lado, o elevado número de cargas negativas, conferidas principalmente pelos grupos sulfato (a heparina corresponde à molécula natural com o maior número de cargas

negativas!), conduzem à interação da heparina com um elevado número de proteínas fisiologicamente importantes, originando diversas complicações (hemorragia, toxicidade hepática, osteoporose, ...). O risco de desenvolver estas complicações foi apenas diminuído com as HBPM. Estas são obtidas a partir da heparina, através de modificações químicas e enzimáticas, e correspondem a uma redução substancial do peso molecular relativamente à heparina. As HBPM apresentam valores de inibição do FXa mais acentuados que do FIIa, e dentro destas, a seletividade para o FXa é tanto maior, quanto menor o seu tamanho. A simplificação molecular da heparina para uma sequência de apenas 5 resíduos (pentassacarídeo) levou à síntese do fondaparinux, um inibidor seletivo do FXa (Figura 1). Por sua vez, o fondaparinux é melhor tolerado que as HBPM. No entanto, exige um processo de síntese complexo, o que, somado com o facto de ser de administração parenteral, como as heparinas, torna o seu uso clínico complexo e dispendioso.

A procura de novos agentes anticoagulantes eficazes, com menos efeitos secundários, com uma composição bem definida e síntese eficaz, é assim um forte desafio para a Química Terapêutica. No início da nossa investigação encontramos descritos na literatura alguns estudos relativos à obtenção de pequenas moléculas sulfatadas não glicosiladas, pertencentes à classe química dos flavonóides

\* Centro de Química Medicinal da Universidade do Porto (CEQUIMED-UP), Laboratório de Química Orgânica e Farmacêutica, Departamento de Ciências Químicas, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto  
E-mail: m\_correiasilva@ff.up.pt

[1], que apesar de apresentarem fraca atividade anticoagulante, foram uma fonte de inspiração para o estabelecimento da nossa estratégia científica.

### Estratégia 1: Fármacos já existentes

A nossa estratégia para o desenvolvimento de novos agentes antitrombóticos seria tentar, por um lado, melhorar a potência anticoagulante dos flavonóides sulfatados não glicosilados descritos na literatura, por outro, mimetizar os anticoagulantes polissacarídicos sulfatados da terapêutica, mas minimizando os seus efeitos secundários (Figura 2).

Estabelecemos, para isso, três características estruturais que, estando presentes conjuntamente, nos levariam a cumprir o nosso objetivo (Figura 2):

- possuir grupos sulfato, necessários para a atividade anticoagulante;

- ser uma pequena molécula que, relativamente às macromoléculas na terapêutica, fosse uma estrutura, do ponto de vista de síntese, mais acessível, e que correspondesse a uma estrutura com menos cargas negativas e com um caráter mais hidrofóbico;
- possuir uma porção glicosídica que permitisse, relativamente ao núcleo flavónico, aumentar o tamanho da molécula, pois afinal “pequeno mas nem tanto” e, conseqüentemente, o número de cargas negativas a serem introduzidas e que, por outro lado, permitisse o reconhecimento molecular característico dos anticoagulantes polissacarídicos.

Assim, a nossa ideia inicial foi a de obter flavonóides glicosilados sulfatados [2]. Mas dentro da imensidão de flavonóides glicosilados, quais selecionar para sofrerem modificação molecular por sulfatação? Pensou-se que seria interessante escolher flavonóides gli-

cosilados que se encontrassem na terapêutica [2]. Isto porque a probabilidade de compostos que resultem de modificações moleculares de agentes terapêuticos já existentes virem a ser utilizados em humanos é bem maior, como já dizia Sir James Black, prêmio Nobel em fisiologia e medicina: “A forma mais proveitosa para a descoberta de novos fármacos é começar com fármacos já existentes”. Assim, foram selecionados flavonóides que já eram utilizados em humanos pelas suas propriedades cardiovasculares. Os flavonóides diosmina, hesperidina, rutina e etoxirutina apresentaram-se como candidatos atrativos à sulfatação por serem utilizados na terapêutica como venotrópicos, bem como uma série de outras moléculas pertencentes a outras classes químicas, por serem nutracêuticos (constituintes de alimentos com comprovados efeitos benéficos para a saúde) ou mesmo utilizadas como suplementos nutricionais, pelas suas propriedades anti-inflamatórias e antioxidantes [3, 4]. Por outro lado, todas as matérias-primas selecionadas constituíam produtos naturais, o que fazia com que meio caminho já tivesse sido percorrido pela Natureza!

### Estratégia 2: OCTOPUS

Ficava agora por definir a estratégia para se avaliar o potencial das pequenas moléculas sulfatadas como futuras alternativas à terapêutica disponível. Para isso seria importante avaliar não só os seus efeitos antitrombóticos *in vitro*, como também antecipar, no processo de descoberta de novos fármacos, a determinação de parâmetros como a estabilidade, a toxicidade e a eficácia *in vivo*. Para tal foi estabelecida uma estratégia com múltiplos tentáculos, avaliando, praticamente em simultâneo, todos os parâmetros citados para cada grupo de análogos químicos desenvolvidos (Figura 3).

### SÍNTESE

Foram sintetizados vinte e dois compostos pertencentes a diversas classes químicas [5]. Na Figura 4 encontram-se as moléculas que foram obtidas por sulfatação que, logo à nascença, já se pareciam muito com os anticoagulantes que conhecemos! Foi

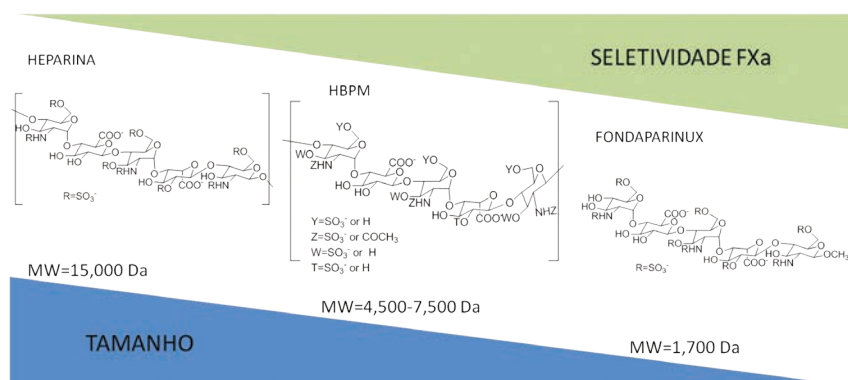


Figura 1 – Anticoagulantes polissacarídicos da terapêutica: a diminuição do tamanho associada ao aumento de seletividade para o FXa

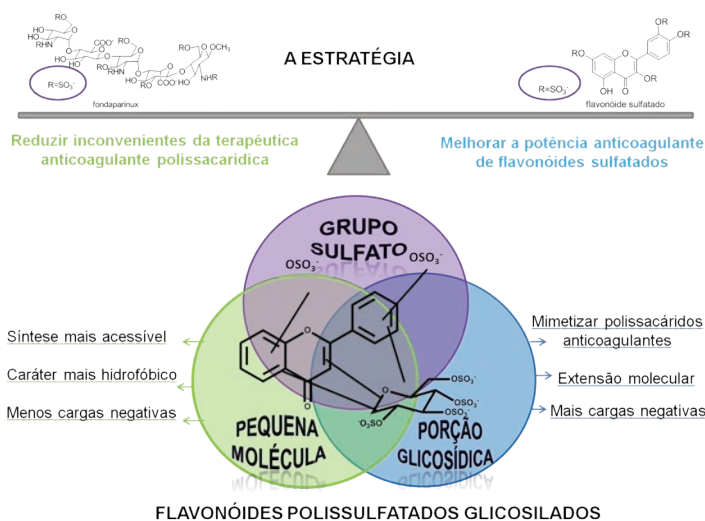


Figura 2 – A estratégia para o desenvolvimento de novos agentes antitrombóticos

utilizado o método de sulfatação com adutos de trióxido de enxofre a 65 °C. O método foi posteriormente melhorado com a utilização de micro-ondas (não tentem isto em casa!), nomeadamente quanto ao tempo de reação (obtenção de derivados sulfatados em apenas 30 minutos em vez de 1 dia, como acontecia com o aquecimento a 65°C).

Os derivados polissulfatados foram obtidos por um processo sintético mais simples que o utilizado para o fondaparinux (podendo mesmo ser efetuado numa só etapa a partir das respetivas matérias-primas), com rendimentos superiores a 80% [6].

### AValiação DA ATIVIDADE NA HEMOSTASE

A avaliação do sistema de coagulação pode ser realizada pela determinação dos tempos clássicos de trombo-plastina parcial ativado (APTT), de protrombina (TP) e de trombina (TT). Estes testes são realizados em plasma humano e devem ser usados primeiramente para mensurar alterações hemostáticas. Todos os compostos polissulfatados prolongaram os tempos de coagulação, tendo sido mesmo capazes de inibir totalmente a coagulação na concentração mais alta testada. O que isto significa é que os compostos desenvolvidos são capazes de inibir por completo a coagulação e podem ser, por isso, também úteis em procedimentos onde seja necessária a inibição total da coagulação. Perante os resultados obtidos foi possível observar a importância do número de grupos sulfato na atividade anticoagulante. Dentro de cada classe química, quanto maior o número de grupos sulfato, maior o efeito anticoagulante observado. Os compostos mais potentes foram a rutina sulfatada (RS) e a xantona glicosilada sulfatada (XGS), tendo duplicado o APTT numa concentração da ordem dos micromolar e com uma potência muito superior aos flavonóides sulfatados descritos na literatura.

Para os mais céticos, achámos importante avaliar se a atividade anticoagulante seria devida aos compostos polissulfatados sintetizados, às matérias-primas não sulfatadas, ou a pro-

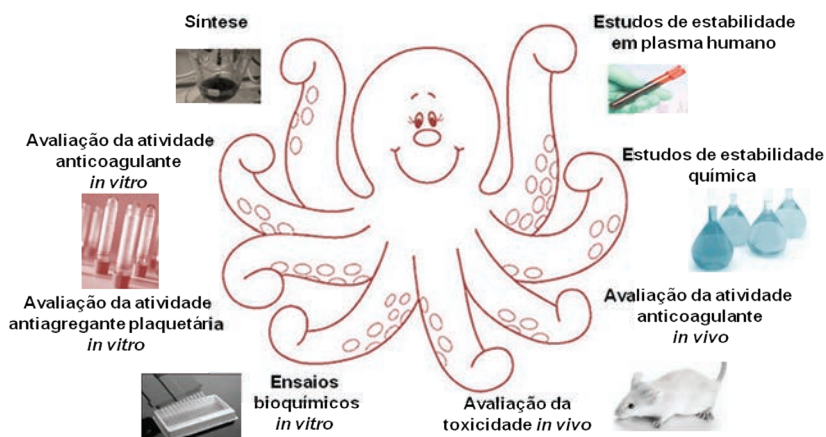


Figura 3 – Estratégia OCTOPUS

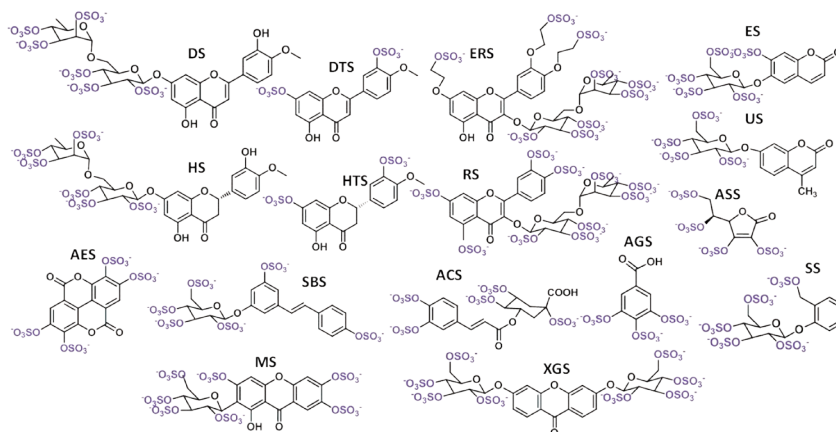


Figura 4 – Compostos polissulfatados sintetizados

duto parcialmente sulfatados, formados eventualmente por degradação em contacto com o plasma humano. O que se verificou foi que as matérias-primas não apresentaram qualquer efeito nos tempos de coagulação e os compostos polissulfatados eram estáveis em plasma humano nas condições ensaiadas.

Na tentativa de compreender o mecanismo de ação anticoagulante dos compostos sintetizados, foram realizados ensaios *in vitro* nas enzimas-alvo dos fármacos na terapêutica anticoagulante, o FXa e o FIIa, na presença e na ausência da ATIII. Atualmente, a inibição direta do FXa constitui o mecanismo de ação mais procurado no desenvolvimento de agentes mais eficazes e seguros. De todos os derivados sulfatados testados, nenhum apresentou qualquer influência sobre a atividade da FIIa, mesmo na presença de ATIII. No que se refere à inibição do FXa, tanto os flavonóides (DS, HS, RS, ERS) como as xantonas (XGS, MS) apresentaram seletividade

de para a inibição do FXa. No caso dos flavonóides foi observado que a posição do açúcar sulfatado influenciava a atividade. Enquanto que os flavonóides com o açúcar na posição 3, RS e ERS, apresentaram capacidade de inibir diretamente o FXa, os flavonóides com o açúcar na posição 7, apenas inibiram o FXa na presença de ATIII. No caso das xantonas, a MS apresentou-se como um inibidor direto do FXa e a xantona XGS exibiu um mecanismo duplo.

Seguidamente foi avaliado se o efeito anticoagulante se verificava na presença de todos os componentes do sangue (ou seja, em sangue mesmo!), onde estão presentes células com um papel importante na coagulação e que não se encontram presentes quando se utiliza apenas plasma. Recorremos à tromboelastografia que, para além de utilizar sangue total, é o método que melhor mimetiza a coagulação *in vivo*. Na presença dos compostos sulfatados, foi possível verificar que o tromboelastograma apresentou o per-



fil de um sangue hipocoagulado, com as reações enzimáticas diminuídas, com níveis de fibrinogénio baixos, e com a diminuição do tamanho máximo do coágulo. Este último parâmetro reflete a importante contribuição das plaquetas tendo, por isso, levantado a suspeita de um possível efeito destes compostos, também a nível das plaquetas. Por isso foi seguidamente investigado o efeito dos compostos sulfatados na agregação plaquetária.

Num equipamento designado por multiplate, que também utiliza sangue total, foi verificado que, na presença destes derivados, também a agregação plaquetária era inibida. Esta descoberta significa que os compostos sintetizados poderão vir a permitir a prevenção tanto da trombose arterial como da venosa!

Finalmente, para avaliar a eficácia putativa *in vivo*, foram determinados os tempos de coagulação, bem como a possibilidade de toxicidade hepática, após a administração intraperitoneal dos compostos mais promissores em ratinhos. Ao contrário da heparina, estes derivados foram ativos intraperitonealmente, mostrando um início de ação rápido e uma duração de ação adequada e não foram verificadas alterações nos valores das enzimas

que são libertadas quando há lesão hepática.

## CONCLUSÃO

Os novos compostos desenvolvidos combinam atividades anticoagulante e antiagregante plaquetária, e poderão permitir, desta forma, uma nova abordagem terapêutica. É esperado que este tipo de perfil seja vantajoso relativamente à terapêutica de combinação de um anticoagulante e um antiagregante plaquetário, pela sua farmacocinética menos complexa, pela probabilidade de incidência mais baixa de efeitos colaterais e pela menor exigência em fase de estudos clínicos. Estes resultados, acrescidos ao facto de terem apresentado estabilidade em plasma humano e um efeito anticoagulante eficaz após a administração em ratinhos, sem sinais preliminares de hepatotoxicidade, permitiram considerar o seu potencial para virem a constituir alternativas na prevenção e tratamento das doenças cardiovasculares.

## AGRADECIMENTOS

Às minhas orientadoras, Profs. Madalena Pinto e Emília Sousa, aos Profs. Franklim Marques e Félix Carvalho, da FFUP, ao Serviço de Imuno-Hemoterapia, do HSJ, e à FCT (SFRH/BD/22962/2005).

## REFERÊNCIAS

- [1] M.E. Sousa, M. Correia-da-Silva, M.M.M. Pinto, 'Sulfated Flavonoids: Nature Playing with the Hydrophilic-Hydrophobic Balance', in G. Brahmachari (Ed.) *Natural products: chemistry, biochemistry and pharmacology* (2008) 392-416.
- [2] M. Correia-da-Silva, E. Sousa, B. Duarte, F. Marques, F. Carvalho, L.M. Cunha-Ribeiro, M.M.M. Pinto, *Journal of Medicinal Chemistry* **54** (2011) 95-106.
- [3] M. Correia-da-Silva, E. Sousa, B. Duarte, F. Marques, L.M. Cunha-Ribeiro, M.M.M. Pinto, *European Journal of Medicinal Chemistry* **46** (2011) 2347-2358.
- [4] M. Correia-da-Silva, E. Sousa, B. Duarte, F. Marques, F. Carvalho, L.M. Cunha-Ribeiro, M.M.M. Pinto, *Journal of Medicinal Chemistry* **54** (2011) 5373-5384.
- [5] M. Correia-da-Silva, 'Synthesis and Biological Activities of Polysulfated Small Molecules: New Cardiovascular Agents', Tese de Doutoramento, Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto, 2011.
- [6] M.M. Pinto, E. Sousa, M. Correia-da-Silva, F. Marques, F. Carvalho, 'Xantonas Sulfatadas e Análogos Xantónicos Glicosilados Sulfatados com Actividade Anticoagulante e Processos para a sua Preparação', Patente Portuguesa nº 104739, 09 Março, 2011.

## ATUALIDADE CIENTÍFICA

### ESPECTROMETRIA DE MASSA: UMA NOVA FERRAMENTA NO COMBATE À CONTRAFAÇÃO

A sofisticação cada vez maior na produção de artigos de contrafação é um problema que afeta gravemente o comércio e o crescimento económico e, quando aplicada a produtos farmacêuticos, perigosa para a saúde humana. Deste modo torna-se necessário encontrar novas estratégias para combater o comércio destes artigos. Neste contexto, um grupo de investigadores norte-americanos da Universidade de Massachusetts, Amherst, liderado por Vincent Rotello, conseguiu desenvolver uma tinta na qual incorporou diferentes nanopartículas de ouro. Este 'código de barras' pode ser detetado de uma forma não destrutiva e amiga do ambiente recorrendo à imagem obtida através de espectrometria de massa com dessorção e ionização a laser, que permite determinar a distribuição espacial das partículas com base na sua massa. Comparativamente a métodos mais convencionais, como a cromatografia associada à espectrometria de massa, estes requerem a destruição da amostra para análise, enquanto que as técnicas analíticas não destrutivas geralmente não fornecem informação química específica.

Através da incorporação de ligandos com uma cadeia alquilo de comprimento variável (e, portanto, com diferentes massas) em nanopartículas, é possível pesquisar seletivamente uma massa específica. A combinação das diferentes nanopartículas permite criar uma "assinatura" complexa que pode ser impressa e que só é visível quando todas as nanopartículas estão presentes. Esta tecnologia terá ainda que superar alguns desafios antes da sua aplicação corrente, nomeadamente a impressão da tinta de nanopartículas em materiais fibrosos, tais como os que são utilizados em notas e materiais de embalagem.

(adaptado de <http://www.rsc.org/chemistryworld/News/2012/April/mass-spectrometry-for-anticounterfeit-packaging.asp>)

**Marcelo Vaz Osório** (marcelovazosorio@gmail.com)  
Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto

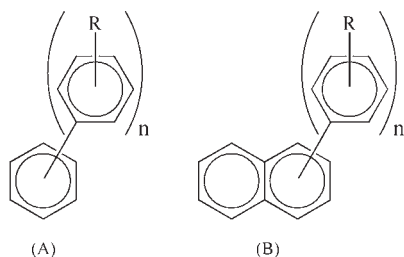
# COMO AS MOLÉCULAS SUBLIMAM...

CARLOS LIMA\*

O equilíbrio de sublimação consiste no equilíbrio termodinâmico estabelecido, a uma determinada temperatura, entre as fases sólida e gasosa de uma substância pura, estando já bem compreendido pela comunidade científica. No entanto, a um nível mecanístico e molecular, este fenómeno é mais complexo do que parece. Neste artigo, o equilíbrio de sublimação de um sólido molecular cristalino é abordado numa perspetiva cinética e dissecado nos seus dois passos elementares: a sublimação (quando as moléculas adquirem energia suficiente e escapam do sólido) e a condensação (quando as moléculas gasosas colidem com a superfície do sólido e são incorporadas na malha cristalina).

## INTRODUÇÃO

O trabalho de um químico pode dividir-se em dois objetivos principais: usar as moléculas para compreender as leis da natureza e usar as leis da natureza para compreender as moléculas. Este artigo foca-se no primeiro objetivo. As moléculas utilizadas consistem num conjunto de fenilbenzenos e fenilnaftalenos (Figura 1), escolhidas com o intuito de explorar, ao nível molecular, a cinética de sublimação.



**Figura 1** – Representação esquemática dos fenilbenzenos (A) e fenilnaftalenos (B) estudados; R = fenil ou H, n = 1-6

De um ponto de vista mecanístico, o processo de sublimação consiste em dois passos elementares: 1) sublimação – escape de moléculas do sólido para a fase gasosa; 2) condensação – impacto de moléculas na superfície do sólido e sua incorporação na malha cristalina. Cada um destes passos ocorre incessantemente e a uma velocidade que depende de muitos fatores, tais como temperatura, forças intermoleculares, simetria e flexibilidade moleculares. Quando as velocidades destes dois passos se igualam, atinge-

-se o equilíbrio entre as fases sólida e gasosa, traduzido macroscopicamente por uma pressão de vapor de saturação. É o balanço destes dois passos elementares que define a posição de equilíbrio de sublimação e estabelece qual a pressão de vapor de um sólido a uma determinada temperatura.

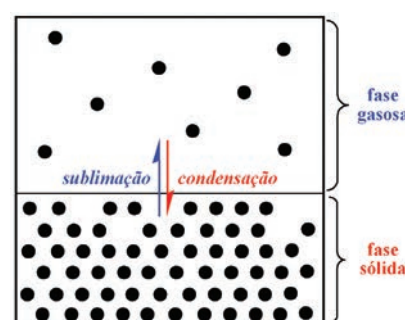
## NO LABORATÓRIO

As pressões de vapor em função da temperatura foram medidas para os compostos estudados, permitindo derivar as entalpias,  $\Delta_{\text{sub}} H_m^0$ , entropias,  $\Delta_{\text{sub}} S_m^0$ , e energias de Gibbs,  $\Delta_{\text{sub}} G_m^0$ , molares de sublimação padrão a uma temperatura de referência (normalmente 298,15 K). Enquanto as entalpias nos dizem quão forte é a coesão entre as moléculas na fase sólida, estando diretamente relacionadas com as forças intermoleculares, as entropias traduzem o grau de liberdade translacional, rotacional e vibracional que as moléculas obtêm ao transitar de um meio cristalino obstruído e ordenado para um meio gasoso desobstruído e caótico.

## DEFINIR O PROBLEMA

Define-se agora claramente o objeto de estudo deste trabalho e o tipo de sistema considerado (Figura 2):

- *Objeto de estudo* – cinética de sublimação e seus dois passos elementares: sublimação e condensação.
- *Tipo de sistema* – sólido molecular cristalino, cuja fase gasosa é constituída por moléculas isoladas e estáveis nas condições consideradas.



**Figura 2** – Esquema do objeto de estudo deste trabalho e sistema considerado

## SUBLIMAÇÃO – QUANDO ELAS ESCAPAM

No estado sólido, as moléculas estão confinadas a um potencial intermolecular que as mantém coesas e ordenadas. Este potencial resulta das forças intermoleculares que atuam entre moléculas vizinhas e que dependem da molécula em questão. Para sublimar, uma molécula necessita de superar o potencial intermolecular e escapar livremente para a fase gasosa. Para isso é preciso energia e, nas condições em que o sólido é a fase mais estável, a energia média por molécula não é suficiente para que elas se separem (se assim fosse, a fase mais estável seria o líquido ou o gás). A molécula precisa então de pedir emprestado um excesso momentâneo de energia às suas vizinhas. Estas oscilações térmicas permitem que a molécula adquira num dado momento energia cinética suficiente para vencer a barreira das forças intermoleculares e sublimar. No entanto, as moléculas levam consigo o excesso de energia emprestado, deixando para trás um sólido arrefecido, o que corrobora a

\* Centro de Investigação em Química, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto  
E-mail: carlos.chemistry@gmail.com

natureza endotérmica da sublimação. É lógico admitir que as moléculas que efetivamente sublimam são aquelas que se encontram à superfície do sólido (as outras estão demasiado obstruídas para conseguirem escapar) e que quanto maior for a área dessa superfície, maior será a velocidade de sublimação. A lei cinética de velocidades para o processo elementar da sublimação toma então a forma:

$$v_{\text{sub}} = k_{\text{sub}} \cdot S \quad (1)$$

onde  $v_{\text{sub}}$  é a velocidade de sublimação (pode ser expressa em moléculas/s),  $k_{\text{sub}}$  a constante de velocidade de sublimação e  $S$  a área de superfície do sólido; segundo a equação de Arrhenius:

$$k_{\text{sub}} = A_{\text{sub}} \cdot \exp(-E_{\text{a,sub}}/RT) \quad (2)$$

sendo  $A_{\text{sub}}$  o fator pré-exponencial,  $E_{\text{a,sub}}$  a energia de ativação,  $R$  a constante dos gases e  $T$  a temperatura.  $E_{\text{a,sub}}$  corresponde à barreira energética que as moléculas têm que ultrapassar para sublimar e relaciona-se diretamente com a energia coesiva do sólido, que por sua vez está intimamente relacionada com  $\Delta_{\text{sub}}H_m^0$ . No sólido, as moléculas ocupam uma posição bem definida e oscilam em torno desta com uma amplitude que é proporcional ao seu conteúdo energético. Normalmente, estas oscilações são pequenas e insuficientes para que a molécula se afaste consideravelmente da sua posição de equilíbrio. Quando, aleatoriamente, a molécula adquire um excesso de energia, as oscilações tornam-se mais vigorosas e a molécula afasta-se da sua posição de equilíbrio até distâncias a que pode já não estar sujeita à prisão do potencial intermolecular, sublimando. Como se pode constatar pela equação (2), admitindo que  $E_{\text{a,sub}} > 0$ , o aumento de temperatura aumenta  $k_{\text{sub}}$ , uma vez que a energia média das moléculas é maior e portanto mais moléculas por unidade de tempo adquirem energia suficiente para vencer  $E_{\text{a,sub}}$ . Para que estes conceitos se tornem visualizáveis, podemos definir o potencial intermolecular como a entalpia de interação intermolecular,  $H_{\text{inter}}$  ( $H_{\text{inter}} \approx \Delta_{\text{sub}}H_m^0$ ), e focarmo-nos numa molécula na superfície de um sólido esférico, como ilustrado na Figura 3. A distância de equilíbrio dessa molécula ao centro da esfera,  $C$ , é traduzida por

$d_c(\text{eq})$  e  $d_c(\text{l})$  traduz a distância limite acima da qual a molécula já não experimenta o potencial intermolecular e sublima livremente. Se considerarmos comportamento de gás ideal, vem que  $H_{\text{inter}} = 0$  na fase gasosa.

Um outro fator que também influencia  $v_{\text{sub}}$  é a pressão atmosférica. As moléculas gasosas embatem com muita frequência na superfície do sólido. O efeito da pressão pode ser visto como um incremento adicional em  $E_{\text{a,sub}}$ , devido às repulsões locais que as moléculas à superfície experimentam com um número médio de moléculas gasosas imediatamente acima. À medida que a pressão aumenta as moléculas do sólido sublimam mais devagar, visto terem mais obstáculos no caminho (Figura 4).

Na Figura 5 apresentam-se os resultados de  $\Delta_{\text{sub}}H_m^0$  para três fenilnaftalenos estudados.

Com o aumento do tamanho da molécula aumenta também  $\Delta_{\text{sub}}H_m^0$ . Isto significa que as forças coesivas se tornam mais intensas, sendo necessário mais energia para separar as moléculas e enviá-las para a fase gasosa. Assim, para a mesma temperatura, as moléculas do composto maior

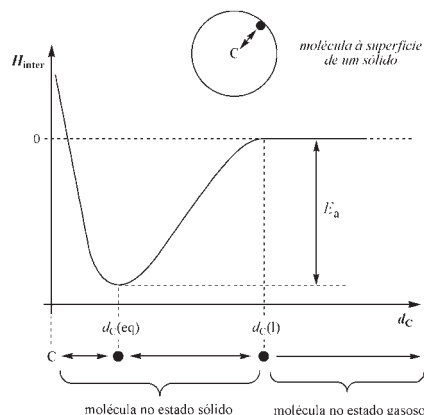


Figura 3 – Esquema da curva  $H_{\text{inter}} = f(d_c)$  para uma molécula à superfície de um sólido esférico

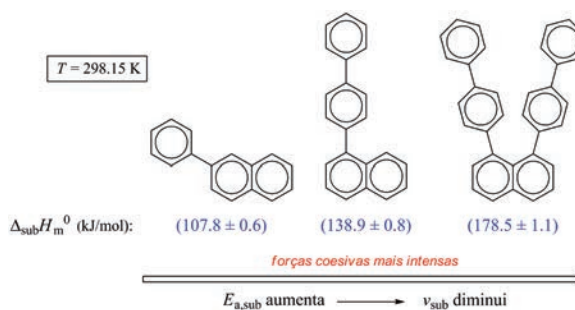


Figura 5 –  $\Delta_{\text{sub}}H_m^0$  para alguns fenilnaftalenos e sua relação com a cinética de sublimação

precisam de mais tempo para se separar, apresentando menor velocidade de sublimação.

## CONDENSAÇÃO – QUANDO BATEM E FICAM

O passo elementar da condensação é ligeiramente mais complexo que o da sublimação. Neste passo as moléculas devem incorporar-se corretamente numa malha cristalina ordenada e regular. O primeiro fator a considerar é a frequência de embate na superfície sólida, bem como a área dessa superfície. Quanto mais frequentes os embates (ou quanto maior a pressão) e quanto maior área, mais moléculas condensarão por unidade de tempo. A lei cinética de condensação é então dada por:

$$v_{\text{cond}} = k_{\text{cond}} \cdot p \cdot S \quad (3)$$

onde  $p$  é a pressão de vapor do composto, não necessariamente a pressão de equilíbrio. A dependência de  $k_{\text{cond}}$  com  $T$  pode ser expressa como:

$$k_{\text{cond}} = A_{\text{cond}} \cdot \exp(-E_{\text{a,cond}}/RT) \quad (4)$$

A parte mais sutil vem a seguir. Será  $E_{\text{a,cond}}$  maior, igual ou menor que zero? Que fatores influenciam  $k_{\text{cond}}$ ? Para responder a estas questões é necessário descer novamente ao micro-mundo das moléculas. Imaginemos então que somos encolhidos à escala molecular e vamos dar um passeio pela superfície de um sólido em equi-

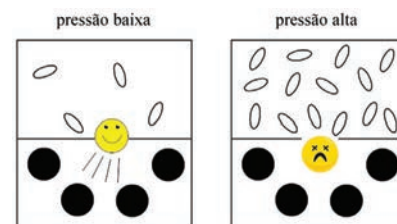


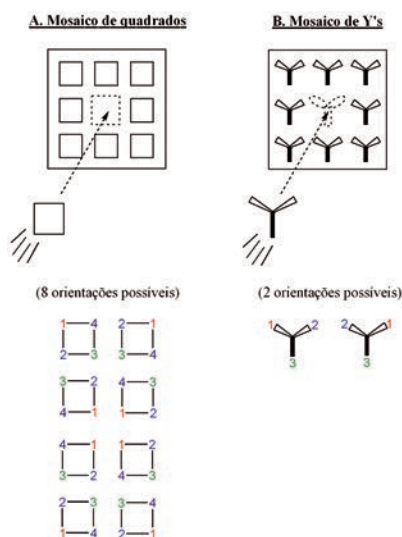
Figura 4 – Imagem ilustrativa do efeito da pressão atmosférica na velocidade de sublimação



líbrio com o seu vapor. Antes de mais temos de nos proteger das imensas moléculas que incessantemente sublimam e daquelas que passeiam na fase gasosa a velocidades aterradoras, assim como devemos tomar especial cuidado às irregularidades do chão que pisamos, pois uma superfície cristalina assemelha-se mais a um terreno montanhoso do que a uma estrada bem alcatroada. E se queremos observar algo que se preze convém abrandar o tempo à escala dos nanossegundos.

No momento do impacto com a superfície, as moléculas possuem uma certa quantidade de energia cinética. Parte dela é dissipada quando as moléculas se aproximam da posição de equilíbrio que ocupam no cristal e começam a sentir o efeito atrativo das forças intermoleculares. No entanto, se a energia cinética da molécula for demasiado alta relativamente à velocidade com que essa energia é dissipada, a ação do potencial intermolecular não vai conseguir imobilizar eficazmente a molécula incidente e provavelmente ela será refletida de volta para a fase gasosa em vez de condensar. Segundo esta lógica, um aumento da temperatura contribui para uma diminuição de  $k_{\text{cond}}$ , uma vez que aumenta a energia cinética média das moléculas e logo a probabilidade de serem refletidas. De acordo com a equação (4), uma diminuição de  $k_{\text{cond}}$  com o aumento de temperatura implica uma  $E_{\text{a,cond}}$  negativa, algo que não é muito comum observar-se em reações químicas.

Podemos imaginar o processo de condensação como um arremesso contínuo de peças ao seu mosaico correspondente e ver quantas lá encaixam por unidade de tempo, ou melhor, do total de peças arremessadas, qual a fração de peças que bate e fica. A esta fração chama-se, na gíria científica, coeficiente de condensação. Todas as peças têm a mesma forma e uma posição bem definida no mosaico. É de reparar, como ilustrado na Figura 6, que formas mais simétricas possuem mais orientações compatíveis com o espaço que a peça ocupa no mosaico. Enquanto que um quadrado apresenta oito orientações espaciais distintas (resultantes de 4 rotações de

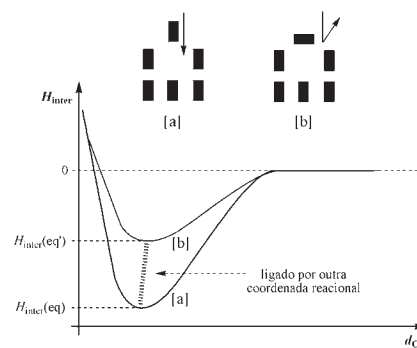


**Figura 6** – Num arremesso aleatório, a maior simetria da peça quadrada leva a uma maior probabilidade de embate correto e incorporação no respetivo mosaico. Num embate mal orientado, a peça não se consegue incorporar no padrão do mosaico e é refletida

90° e 4 eixos de reflexão – horizontal, vertical e 2 diagonais) os Y's apresentam apenas duas. Assim, construir um mosaico de Y's exige mais tempo e esforço do que construir um mosaico igualmente grande de quadrados (é necessário um esforço extra para orientar os Y's corretamente).

A transposição deste raciocínio para o mundo molecular é imediata. Um sólido cristalino tem uma estrutura bem ordenada e cada molécula ocupa uma posição de equilíbrio bem definida. Cada nova molécula incorporada tem de adquirir uma orientação correta relativamente às suas vizinhas. Sendo assim, a orientação relativa das moléculas gasosas aquando do impacto com a superfície do sólido afeta a probabilidade de condensação. Se a molécula choca com a orientação correta, a probabilidade de condensar será apenas influenciada pela energia cinética que possui nesse momento. No entanto, se a molécula choca com uma orientação muito distinta daquela que deveria adotar na malha cristalina, vai sentir um potencial intermolecular mais fraco e demorar mais tempo a atingir a posição de equilíbrio, aumentando a probabilidade de ser refletida.

A Figura 7 ilustra um caso geral onde a molécula bate com a orientação correta, [a], e incorreta, [b].



**Figura 7** – Curva  $H_{\text{inter}} = f(d_c)$  para uma molécula que bate no sólido cristalino com uma orientação correta, [a], e incorreta, [b]

Em [a] a molécula atinge facilmente o mínimo absoluto em  $H_{\text{inter}}$  e tem maior probabilidade de condensar. Em [b] a molécula pode conseguir atingir um mínimo relativo em  $H_{\text{inter}}$  e então relaxar para o mínimo absoluto por intermédio de uma outra coordenada reacional (por exemplo, rodando em torno de si própria). No entanto, antes que a molécula tenha tempo para relaxar o excesso de energia cinética ainda não dissipado, pode jogar a sua cartada e enviar a molécula de volta para o gás. Desta forma, moléculas mais simétricas apresentam maior probabilidade de condensar porque a maior simetria aumenta o número de orientações corretas da molécula relativamente à malha cristalina. Este número é igual ao número de simetria externa de uma molécula,  $\sigma_{\text{sim}}$ , definido como o número de orientações únicas de uma molécula rígida que apenas permutam átomos idênticos. Maior  $\sigma_{\text{sim}}$  aumenta a probabilidade de condensação, o que pode ser traduzido matematicamente pela discriminação deste número na equação (4), resultando em:

$$k_{\text{cond}} = \sigma_{\text{sim}} \cdot A'_{\text{cond}} \cdot \exp(-E_{\text{a,cond}}/RT) \quad (5)$$

onde foi considerado que

$$A_{\text{cond}} = \sigma_{\text{sim}} \cdot A'_{\text{cond}}$$

Um outro fator que pode influenciar  $k_{\text{cond}}$  é a flexibilidade molecular, que se traduz na possibilidade da molécula poder alterar a sua geometria adquirindo outras conformações estáveis ou deformando-se significativamente devido a rotações internas de grupos flexíveis. Este facto pode levar a uma dificuldade acrescida em cristalizar,

uma vez que na fase gasosa a molécula vai adotando ao longo do tempo algumas geometrias incompatíveis com a fase cristalina (Figura 8). Uma vez que a malha cristalina é altamente seletiva, estas geometrias apresentam menor probabilidade de efetivamente condensar, diminuindo  $k_{\text{cond}}$ .

As contribuições da simetria e flexibilidade refletem-se termodinamicamente em  $\Delta_{\text{sub}} S_m^0$ . Mais simetria está associada a um aumento da entropia do sólido, logo menor  $\Delta_{\text{sub}} S_m^0$ , porque existem mais formas equivalentes de construir a malha cristalina. Mais flexibilidade está associada a mais liberdade conformacional, que se faz sentir principalmente na fase gasosa (no

cristal o potencial intermolecular restringe a molécula a uma geometria), levando a um aumento da entropia do gás e, conseqüentemente, de  $\Delta_{\text{sub}} S_m^0$ . Na Figura 9 ilustra-se este raciocínio utilizando dois fenilbenzenos estudados.

#### POR FIM O EQUILÍBRIO

O equilíbrio é o resultado harmonioso deste incessante e competitivo reboleio molecular; enquanto a sublimação desfaz o sólido, a condensação reconstrói-o. A situação de equilíbrio, traduzida por uma pressão de vapor de saturação, corresponde às condições a que as duas velocidades se igualam,  $v_{\text{sub}} = v_{\text{cond}}$  para  $p = p_{\text{eq}}$  (Fi-

gura 10). Rearranjando as equações anteriormente apresentadas vem:

$$p_{\text{eq}} = \frac{k_{\text{sub}} \cdot S}{k_{\text{cond}} \cdot S} = \frac{A_{\text{sub}} \cdot \exp(-E_{\text{a,sub}}/RT)}{\sigma_{\text{sim}} \cdot A'_{\text{cond}} \cdot \exp(-E_{\text{a,cond}}/RT)} \quad (6)$$

onde se constata facilmente que mais simetria e maior  $\Delta_{\text{sub}} H_m^0$  (proporcional a  $E_{\text{a,sub}}$ ) diminuem a pressão de vapor de uma substância, tornando-a por isso menos volátil.

Neste artigo, o *casamento* entre cinética e termodinâmica torna-se claro e é fácil ver como os dois se relacionam e podem ser compreendidos usando a imaginação para viajar ao pequeno mundo das moléculas.

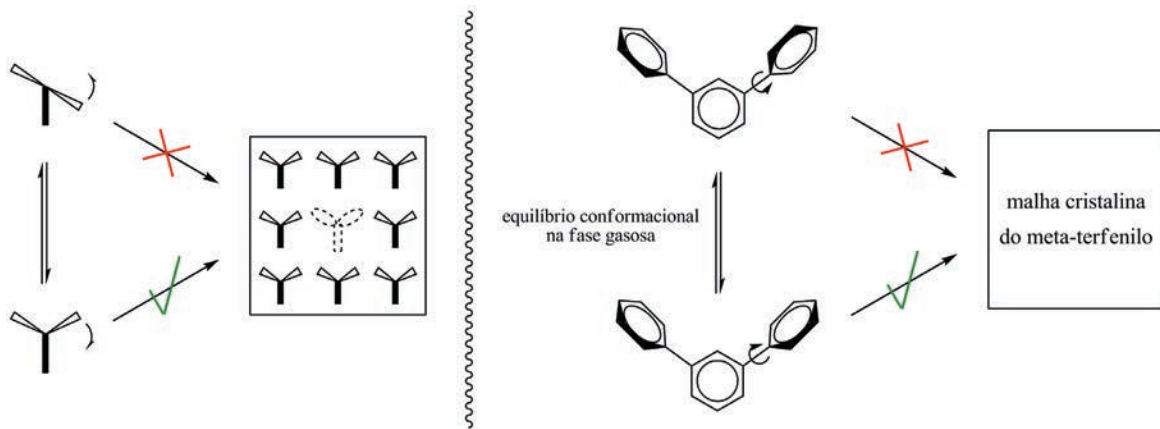


Figura 8 – A possibilidade de a molécula adotar outras conformações na fase gasosa pode diminuir a probabilidade de condensação, uma vez que apenas a conformação correta cristaliza

#### Geometrias na fase cristalina

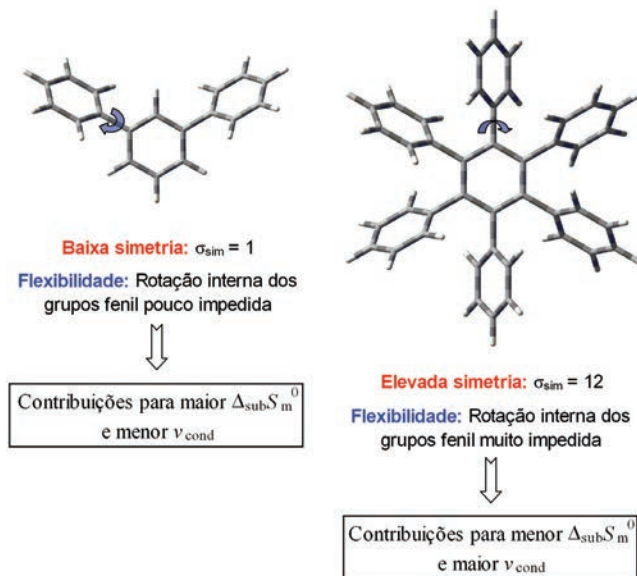


Figura 9 – Exemplos da influência da simetria e flexibilidade moleculares em dois fenilbenzenos

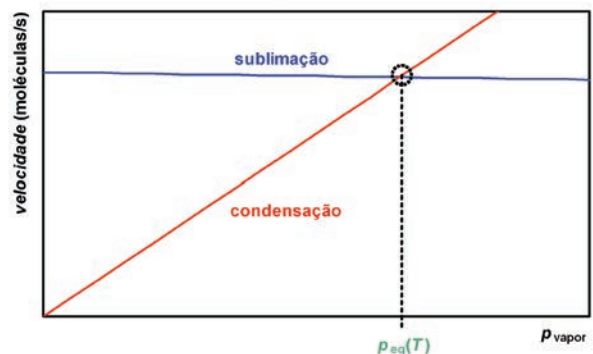


Figura 10 – Velocidades de sublimação e condensação em função da pressão de vapor, a temperatura constante; o equilíbrio atinge-se quando estas velocidades se igualam

## CHUVA DE QUÍMICOS?

PATRÍCIA S. M. SANTOS\*

**S**endo a chuva a forma de precipitação que mais frequentemente ocorre em todo o planeta e que liga aspetos como o ciclo hidrológico e o clima, é de elevada importância o seu estudo do ponto de vista químico. Este trabalho visou contribuir para o conhecimento das características químicas da água da chuva, explorando os efeitos da origem e sazonalidade da chuva numa cidade costeira localizada no sudoeste da Europa.

### INTRODUÇÃO

Quando tanto se fala em poluição atmosférica e alterações climáticas, depressa nos questionamos como é que estes dois aspetos se relacionam entre si e conosco seres humanos. Como é que os poluentes atmosféricos, e os outros componentes que existem na atmosfera e não são poluentes, afetam os ecossistemas terrestre e aquático e por sua vez os seres humanos?

Sendo a precipitação o mecanismo primário que transporta a água da atmosfera para a superfície da Terra, ela afeta diretamente os ecossistemas terrestre e aquático, além de afetar a qualidade da vida humana através da disponibilidade da água doce. Por outro lado, a precipitação é também o processo físico “chave” que liga aspetos como o ciclo hidrológico e o clima, através da sua interação com os sistemas hidrosfera, criosfera, biosfera, atmosfera e superfície da Terra. A precipitação pode apresentar-se sob várias formas, dentre as quais, chuva, neve e granizo. Sendo a chuva a forma de precipitação que mais frequentemente ocorre em todo o planeta, o seu estudo desperta interesse. Assim, várias questões surgem quanto à química da água da chuva. Qual a composição da água da chuva? O que afeta a composição da água da chuva? Que efeitos tem a composição da água da chuva no ambiente e no clima? Foi com o propósito de responder a estas e a outras ques-

tões que se iniciou o estudo do meu doutoramento: “Origem, sazonalidade e características químicas da água da chuva em Aveiro”.

O estudo das características químicas da água da chuva foi realizado com chuva coletada entre setembro de 2008 e setembro de 2009 em Aveiro, cidade costeira localizada no sudoeste da Europa. Este foi o primeiro estudo que explorou os efeitos da sazonalidade e das trajetórias das massas de ar na composição orgânica da água da chuva na Europa e, certamente, um dos primeiros realizados em todo o mundo. Além disso, a composição inorgânica da água da chuva foi determinada e comparada com os resultados obtidos 20 anos antes, de modo a detetar possíveis alterações que pudessem ter ocorrido.

Uma das grandes dificuldades deste estudo foi a recolha das amostras de água da chuva, pois é um processo que depende da ocorrência de eventos de precipitação. Por outro lado, as várias técnicas analíticas aplicadas às amostras de água da chuva exigiram elevados volumes de amostras e um eficiente tempo de processamento das mesmas, de modo a preservá-las nas suas melhores condições para manterem a sua representatividade.

### FILTRAÇÃO E PRESERVAÇÃO DAS AMOSTRAS DE ÁGUA DA CHUVA

A importância de estudar a fração orgânica da água da chuva foi realçada apenas recentemente (2000) por Willey et al. [1]. Uma revisão do trabalho publicado depois dessa data revelou

que diferentes procedimentos de filtração e preservação têm sido adotados para o estudo da fração orgânica da água da chuva. Tendo sido isso verificado e devido às baixas concentrações da matéria orgânica na água da chuva (considerada pela população em geral como água destilada), é de elevada importância o rigor analítico e o cuidado de evitar qualquer contaminação ao longo dos vários passos analíticos. Por conseguinte, decidiu-se estudar os efeitos da filtração e preservação da matéria orgânica dissolvida (DOM) por aplicação da técnica analítica de espectroscopia de fluorescência molecular (técnica sensível, não destrutiva, de rápida utilização). Assim, foram comparados dois dos tamanhos de poro de filtros mais usados, 0,22 e 0,45  $\mu\text{m}$ , e os resultados mostraram que as propriedades fluorescentes da DOM da água da chuva filtrada por ambos os filtros são semelhantes quando as análises são realizadas no dia da amostragem. O presente estudo propõe a filtração da água da chuva através do tamanho de poro 0,45  $\mu\text{m}$  para separar a matéria orgânica solúvel da particulada, visto que este tamanho de poro é o que reúne consenso quanto à definição operacional da DOM. Relativamente à preservação das amostras de água da chuva, estas devem ser preservadas a 4°C no escuro, mas não mais do que 4 dias após a recolha.

### ISOLAMENTO DA MATÉRIA ORGÂNICA DISSOLVIDA NA CHUVA

No sentido de também contribuir para a uniformização de procedimentos de análise, outro ponto estudado foi

\* CESAM & Departamento de Química da Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro  
E-mail: patricia.santos@ua.pt



o procedimento de isolamento da DOM da água da chuva. Assim, foram comparados dois procedimentos apresentados na literatura (Figura 1), o procedimento baseado na adsorção na resina DAX-8 [2] e o procedimento baseado na retenção em sorbente de C-18 [3]. Para tal, utilizaram-se as técnicas espectroscópicas de UV-visível e de fluorescência molecular. Ambos os procedimentos de isolamento extraíram preferencialmente a fração da DOM de maior peso molecular. Contudo, os compostos do tipo proteico e do tipo húmico foram igualmente extraídos da água da chuva pelo procedimento de C-18, sendo a DOM extraída representativa da matriz original (Figura 2). Por outro lado, o procedimento da DAX-8 extraiu preferencialmente os compostos do tipo húmico, comparativamente com os compostos do tipo proteico (Figura 2). Assim, o procedimento da DAX-8 pode ser útil quando o interesse é estudar a fração húmica (mistura complexa e heterogênea de compostos orgânicos aromáticos e alifáticos) da DOM da água da chuva. Como parte do trabalho

seguinte de caracterização da água da chuva seria o estudo da fração húmica, o procedimento da DAX-8 foi o adotado para o isolamento e extração da DOM.

#### FRAÇÃO ORGÂNICA DA CHUVA: ORIGEM E SAZONALIDADE

Durante o período de amostragem considerado (setembro de 2008 a setembro de 2009), 80% da água da chuva coletada em Aveiro esteve associada a massas de ar oceânicas (Figura 3a), enquanto a restante chuva esteve relacionada com massas de ar com características terrestres e antropogénicas (Figura 3b).

Os efeitos da sazonalidade e das trajetórias das massas de ar na DOM da matriz original da água da chuva de Aveiro (sem nenhuma extração prévia da DOM) foram primeiramente avaliados nas amostras de chuva utilizando as espectroscopias de UV-visível e fluorescência molecular, e por determinação do conteúdo de carbono orgânico dissolvido (DOC). As técnicas espectroscópicas utiliza-

das revelaram que a matéria orgânica dissolvida cromofórica (CDOM; termo frequentemente utilizado para referir a DOM que absorve radiação na gama do UV-visível) é uma contribuidora importante da matéria orgânica na chuva. A água da chuva mostrou propriedades óticas semelhantes às de outras águas naturais, sugerindo que compostos que fazem parte da CDOM da chuva podem ser derivados de fontes superficiais e/ou de processos que originam ou modificam as substâncias do tipo húmico na atmosfera.

A água da chuva do verão e outono exibiu um maior conteúdo de CDOM e DOC que a chuva do inverno e primavera. Além disso, a chuva da primavera, verão e outono apresentou menor tamanho molecular, o que pode dever-se à ocorrência de maior fotodegradação da DOM nestas estações, comparativamente com o inverno.

A chuva associada a massas de ar marítimas apresentou menor conteúdo de CDOM que a chuva com contribuições terrestres/antropogénicas, realçando que a chuva marítima é mais "limpa" que a chuva continental. Além disso, as amostras de chuva associadas a massas de ar com origem na Europa continental e transportadas sobre o oceano apresentaram maior conteúdo de CDOM e maior predominância de compostos orgânicos com maior grau de conjugação ou aromaticidade que a chuva proveniente da área mediterrânea e, por sua vez, que a chuva de origem marítima. Estes dados evidenciam que as fontes antropogénica e terrestres são contribuidoras importantes da CDOM na chuva. Assim, quem imaginaria que

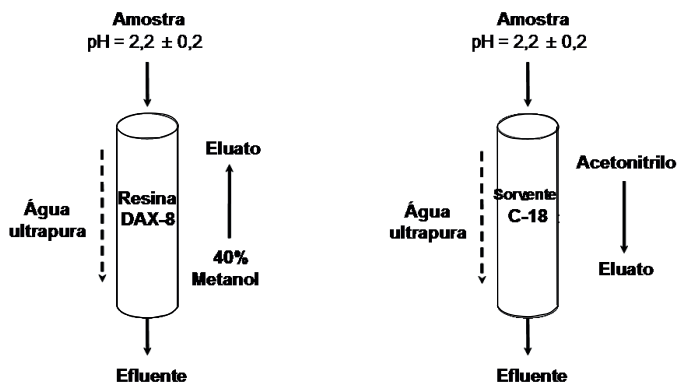


Figura 1 – Diagrama esquemático dos procedimentos experimentais adotados para isolamento da DOM da água da chuva

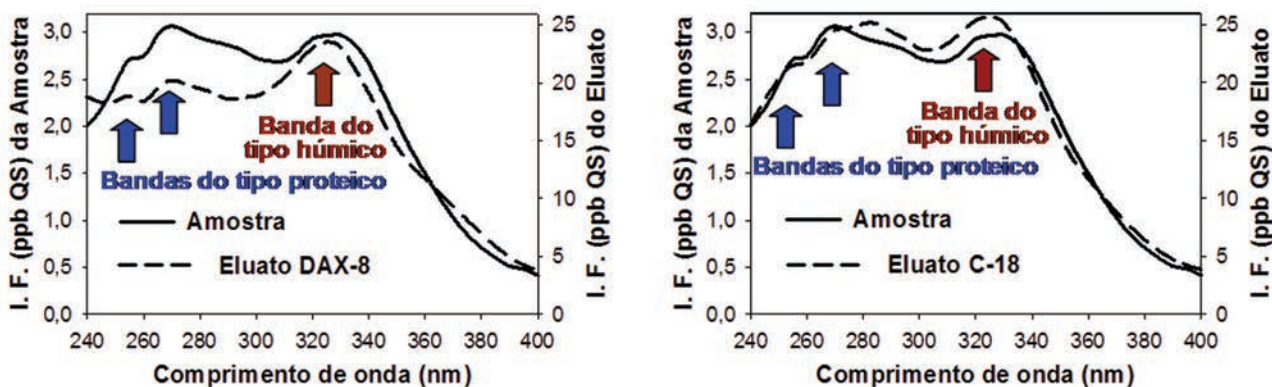
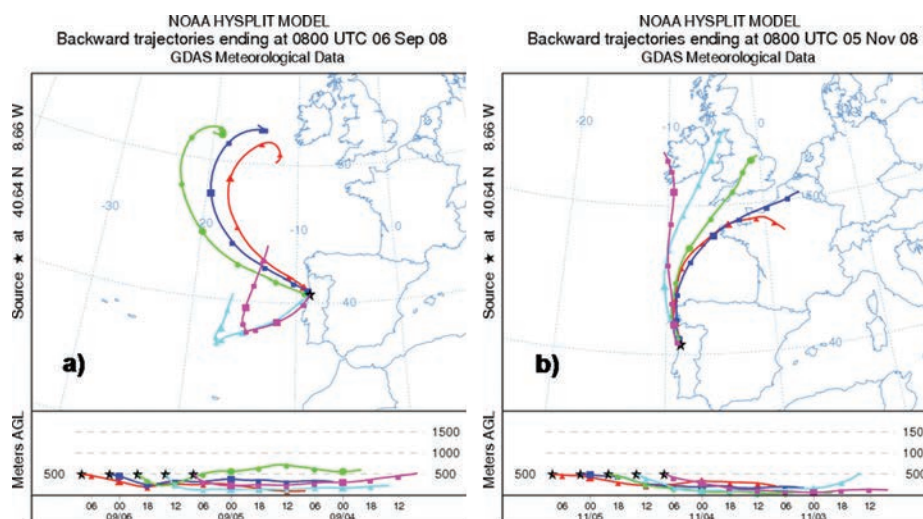


Figura 2 – Espectros de fluorescência síncrona ( $\Delta\lambda = 70$  nm) de uma amostra recolhida em outubro de 2009 e dos respetivos eluatos obtidos com os procedimentos da DAX-8 e C-18



**Figura 3** – Trajetórias das massas de ar a 500 m de altura obtidas para amostras de chuva recolhidas a 6 de setembro de 2008 (a) e a 5 de novembro de 2008 (b), exemplificativas de amostras associadas a massas de ar oceânicas e terrestres/antropogénicas, respetivamente. As trajetórias foram obtidas utilizando o modelo “Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory” (HYSPLIT; [www.arl.noaa.gov/HYSPLIT.php](http://www.arl.noaa.gov/HYSPLIT.php))

**Tabela 1** – Médias pesadas em volume das concentrações de iões determinadas para as amostras de chuva coletadas em 2008-2009 e para as mesmas agrupadas de acordo com as trajetórias das massas de ar aos quais estavam associadas (chuva marinha; chuva da Europa industrializada; chuva mediterrânica). Estes valores são comparados com os obtidos por Pio et al. [4] para a chuva recolhida entre 1986 e 1989

Período de amostragem / massas de ar	H <sup>+</sup> (μEq/L)	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> (μEq/L)	Cl <sup>-</sup> (μEq/L)	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (μEq/L)	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> (μEq/L)	NSS-NO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> (μEq/L)
2008-2009	5,1	13,2	145	28,0	23,5	8,6
(n = 40)	(± 0,9)	(± 1,5)	(± 26,2)	(± 3,4)	(± 2,9)	(± 1,2)
Chuva marinha	4,2	10,3	171,9	28,3	25,5	7,8
(n = 30)	(± 0,9)	(± 1,0)	(± 29,6)	(± 3,8)	(± 3,2)	(± 0,9)
Chuva da Europa industrializada	23,2	29,6	34,3	47,3	25,1	21,6
(n = 3)	(± 15,4)	(± 17,5)	(± 21,1)	(± 3,8)	(± 13,4)	(± 12,8)
Chuva mediterrânica	6,3	24,3	30,7	23,2	13,5	11,1
(n = 7)	(± 2,2)	(± 6,0)	(± 7,4)	(± 7,2)	(± 5,8)	(± 5,4)
1986 <sup>1</sup>	5,9	23,7	217	8,6	36,9	23,4
1987 <sup>1</sup>	6,5	22,3	127	7,4	39,5	27,3
1988 <sup>1</sup>	4,0	18,5	159	9,0	41,5	25,2
1989 <sup>1</sup>	3,8	27,9	130	14,8	68,5	56,1
Chuva marinha <sup>1</sup>	2,7	19,2	166	7,9	44,2	29,9
Chuva da Europa industrializada <sup>1</sup>	41,0	41,5	141	38,3	75,4	60,9
Chuva mediterrânica <sup>1</sup>	2,9	42,7	30	13,5	35,2	33,0

n = número de eventos de chuva.

Os valores dos desvios padrão estão indicados entre parêntesis.

<sup>1</sup> Dados de Pio et al. [4].

Portugal, mais concretamente Aveiro, era afetado pelas massas de ar poluídas vindas do centro europeu e transportadas sobre o mar?

### FRAÇÃO HÚMICA DA CHUVA

A influência das estações do ano nas propriedades químicas da fração do tipo húmico da DOM da água da chuva, fração extraída pelo procedimento baseado na adsorção na resina DAX-8, também foi avaliada. Para tal, utilizaram-se as espectroscopias de UV-visível, fluorescência molecular

e ressonância magnética nuclear de protão (<sup>1</sup>H RMN). Os resultados mostraram que a DOM extraída das amostras de chuva em todas as estações consiste numa mistura complexa de compostos hidroxilados e de ácidos carboxílicos, com um carácter predominantemente alifático, e um baixo conteúdo da componente aromática. A semelhança das propriedades observadas na fração do tipo húmico da chuva de todas as estações do ano sugere que essas propriedades podem ser consideradas como uma “impressão digital” deste tipo de subs-

tâncias húmicas, pelo menos na água da chuva de Aveiro.

### FRAÇÃO INORGÂNICA DA CHUVA EM AVEIRO: O QUE MUDOU EM 20 ANOS?

Quanto à fração inorgânica da água da chuva coletada entre setembro de 2008 e setembro de 2009 em Aveiro, as concentrações dos iões H<sup>+</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> foram comparadas com os dados obtidos por Pio et al. [4] para a chuva recolhida entre 1986 e 1989 (Tabela 1). Os resultados mostraram que em ambos os períodos de

amostragem a concentração do ião Cl<sup>-</sup> foi muito maior que as concentrações dos iões H<sup>+</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, provavelmente devido à predominância de chuva associada a massas de ar oceânicas (chuva contendo NaCl) e devido ao facto do local de amostragem ser costeiro por natureza. Além disso, comparando as concentrações dos restantes iões em 2008-2009 com aquelas encontradas 20 anos antes, obtêm-se as seguintes conclusões: as concentrações do ião H<sup>+</sup> estiveram na mesma gama de valores; as concentrações dos iões NH<sub>4</sub><sup>+</sup> e NSS-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> de origem não marinha) foram menores, sendo que a diminuição das concentrações de NH<sub>4</sub><sup>+</sup> pode dever-se à diminuição das atividades agrícolas na área de amostragem, enquanto a diminuição das concentrações de NSS-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> pode estar associada à redução de emissões de SO<sub>2</sub> devido ao menor conteúdo de enxofre em derivados de óleo (petróleo); as concentrações do ião NO<sub>3</sub><sup>-</sup> foram maiores (cerca do dobro), tendo sido atribuído ao aumento da industrialização em Aveiro, assim como ao aumento do tráfego veicular durante os últimos 20 anos. Verificou-se também que em 2008-2009 a concentração do ião NO<sub>3</sub><sup>-</sup> foi elevada quando as massas de ar provieram do Oceano Atlântico, realçando a ocorrência da contribuição de fontes locais para a composição iónica da água da chuva. Além disso, análises estatísticas efetuadas (análises de fator e de coeficientes de correlação), sugerem que a presença dos iões NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e NSS-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> na água da chuva é derivada principalmente de fontes antropogénicas. Assim, estes iões terão sido incorporados abaixo do nível das nuvens por arrastamento da matéria particulada do ar. Por outro lado, como observado em 1986-1989, também em 2008-2009 a chuva relacionada com massas de ar da Europa industrializada mostrou concentrações mais elevadas

para os iões NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e NSS-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, evidenciando que estes iões foram eficientemente transportados de longas distâncias sobre o oceano, e sugerindo que as fontes antropogénicas destes iões na Europa industrializada afetam a composição iónica da chuva a sudoeste da Europa.

### IMPLICAÇÕES

A determinação da composição química da chuva em Aveiro providencia uma compreensão das fontes que contribuem para a química da água da chuva, e ajuda na compreensão da dispersão de poluentes a nível local e regional, assim como dos seus impactos nos ecossistemas através dos processos de deposição. A presença de CDOM, que foi demonstrada ser uma importante componente da chuva, pode exercer um efeito determinante na maior ou menor absorção atmosférica de radiação solar, o que consequentemente afeta a quantidade de radiação solar absorvida pelo planeta, e por sua vez afeta o clima. Além da presença de compostos cromofóricos na água da chuva, a DOM afeta os ecossistemas terrestre e aquático, e consequentemente os seres humanos, pois a chuva é fonte predominante de toda a água doce.

A água da chuva em Aveiro esteve predominantemente associada a massas de ar "limpas", massas de ar atlânticas. Contudo, a chuva removeu aerossóis da atmosfera na região de Aveiro, realçando a importância da contribuição de fontes locais para a composição química da água da chuva. Quando as massas de ar vieram das partes industrializadas da Europa, a água da chuva foi enriquecida com elevado conteúdo de constituintes químicos, quer orgânicos, quer inorgânicos, realçando a contribuição das fontes terrestres/antropogénicas.

Por outro lado, quando as massas de ar vieram da área do mediterrâneo, foi encontrado um baixo conteúdo de constituintes químicos, mas mais elevado do que foi observado para as amostras associadas a massas de ar marítimas, indicando baixa contribuição das fontes terrestres/antropogénicas, quando comparadas com a chuva da Europa industrializada.

As massas de ar terrestres/antropogénicas têm consequências para a vida humana local devido ao potencial de alterar a distribuição ambiental dos poluentes químicos. No futuro, certamente que a investigação irá direcionar-se para a identificação dos constituintes químicos individuais na água da chuva e das suas fontes específicas, de modo a antecipar os efeitos da poluição química no ambiente em rápida mudança, e a identificar e mitigar os efeitos nos seres humanos e nos ecossistemas mais vulneráveis.

### AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores Prof. Doutor Armando Duarte e Prof. Doutora Eduarda Santos, à Doutora Marta Otero, a todos os que me ajudaram para a concretização do trabalho, e à FCT pela concessão da bolsa de doutoramento (SFRH/BD/27379/2006).

### REFERÊNCIAS

- [1] J.D. Willey, R.J. Kieber, M.S. Eyman, G.B. Avery, *Global Biogeochemical Cycles* **14** (2000) 139–148.
- [2] P.S.M. Santos, M. Otero, R.M.B.O. Duarte, A.C. Duarte, *Chemosphere* **74** (2009) 1053–1061.
- [3] R.J. Kieber, R.F. Whitehead, S.N. Reid, J.D. Willey, P.J. Seaton, *Journal of Atmospheric Chemistry* **54** (2006) 21–41.
- [4] C.A. Pio, M.L. Salgueiro, T.V. Nunes, *Atmospheric Environment* **25A** (1991) 2259–2266.

# Sociedade Portuguesa de Química

Vá a [www.spq.pt](http://www.spq.pt) e participe nos eventos apoiados pela SPQ



# 100 ANOS DA QUÍMICA EM PORTUGAL SOB OS AUSPÍCIOS DA SPQ

## Parte III. Indicadores de Modernidade na Química do Século XX

SEBASTIÃO J. FORMOSINHO\*

Após a 2ª Grande Guerra começa a reconhecer-se para a ciência uma forte *função social* e a Química, que já havia desempenhado papel de relevo na industrialização tecnológica do século XIX, vai surgir progressivamente desagregada em subdisciplinas, como uma *ciência de serviço*, vindo a tornar-se a *ciência central* no contexto e hierarquia de todas as ciências. Um pouco por toda a ciência, e também na química, a multiautoria dos artigos científicos é um indicador do progresso científico, do fomento da especialização e do caráter interdisciplinar dos problemas com que a ciência se tem vindo a defrontar e resolver. É perante este indicador que podemos avaliar da rutura que Andrade de Gouveia introduz no panorama da investigação em química em Portugal, com o estabelecimento de equipas de investigação. Se a partir dele o panorama da química portuguesa não retrocedeu na modernidade da sua investigação é porque surgiram novas levas de químicos nas diferentes universidades portuguesas, nomeadamente em Lisboa, Coimbra e Porto, que asseguraram a existência de uma massa crítica de doutorados. É a esta luz que, nas vicissitudes históricas da ciência em Portugal, se pode compreender melhor o facto de, quando comemoramos o 1º Centenário da fundação da “Sociedade Portuguesa de Química”, ser precisamente a Química a área da ciência portuguesa com maior número de citações científicas.

Na *Big Science*, a investigação situa-se num plano que, mesmo para o cidadão comum, ultrapassa o do investigador isolado, na responsabilidade pessoal, na iniciativa, no controlo; o cientista tem de trabalhar integrado numa “equipa de investigação” para atacar qualquer problema de pesquisa. O reconhecimento do problema, a conceção do projeto, os trabalhos de pesquisa e a respetiva supervisão são algumas das etapas que requerem a intervenção de diversos investigadores, e a ciência tem vindo a tornar-se cada vez mais colaborativa. Ao ponto de em 2010 se ter alcançado o recorde de autores num artigo científico: 3332 autores de 32 países e 225 instituições [1, 2]. Dizia-se com ironia em passado recente que «havia artigos com mais autores do que parágrafos». Hoje verifica-se que há artigos com mais instituições do que parágrafos. Obviamente, em condições de equipas de muitos autores, vai-se diluindo o prestígio decorrente da autoria da comunicação científica. Mas tais equipas, em muito menor dimensão do que nos dias de hoje, remontam já ao século XIX – o professor com os seus discípulos.

### AS TRANSFORMAÇÕES DA CIÊNCIA DURANTE O SÉCULO XX

Em 1963, o sociólogo das ciências Della de Solla Price [3] mostrava que a atividade científica, expressa em termos do número de revistas científicas de caráter periódico, havia crescido exponencialmente durante cerca de 300 anos (desde 1665 até essa data). O número de artigos publicados duplicava em cada 10-15 anos, a uma taxa de crescimento anual entre os 5% e 7%. A ciência moderna foi claramente uma *ciência em expansão* desde o século XVII. No século XIX foi incorporada nas universidades e a investigação associada ao ensino superiorolveu-se numa profissão regular.

A manter-se o referido ritmo de crescimento, já em 1963 Solla Price [4] alertava para o facto de que as despesas com a investigação, de cerca de 1% do Produto Nacional Bruto (PNB) nesse ano, seriam de 5% do PNB no ano 2000 e atingiriam os 20% do PNB no ano 2030. Como tal era claramente impossível, Solla Price previa um declínio neste ritmo de crescimento. No que concerne às despesas com I&D, a estabilização deu-se por meados da década de 70 ao nível dos 2% a 3% do PNB em países avançados como os Estados Unidos, Japão, Reino Unido e Alemanha.

Hoje a ciência adquiriu uma dimensão, um custo e uma importância para o progresso económico das nações que já não pode mais ser deixada só nas mãos dos cientistas. Nos países mais avançados a ciência encontra-se “num regime estacionário”. Regime em que a ciência está condicionada pelos fundos para a pesquisa, pelas posições académicas e de investigação, e pelas páginas em revistas de prestígio (*era da competição por recursos escassos*). Em oposição à *idade da pura competição intelectual*, em que o progresso da ciência estava condicionado pelos limites da imaginação e criatividade dos cientistas. Como referimos, a *autoria múltipla* dos artigos científicos é um dos indicadores que revela uma alteração progressiva no modo de fazer ciência no decorrer do século XX, por aumento progressivo das equipas de investigação.

Um tal aumento das equipas deve-se, em muito, à necessidade de a ciência atacar e procurar resolver problemas cada vez mais complexos. Em 1939, o cristalógrafo britânico John Desmond Bernal advogava que a ciência poderia resolver muitos problemas de interesse social, e mostrava que nessa época a eficiência social da investigação científica seria somente de cerca de 2%, mormente na Grã-Bretanha. O

\* Departamento de Química, Universidade de Coimbra, Rua Larga 3004-535 Coimbra  
E-mail: sformosinho@qui.uc.pt

começo da 2ª Grande Guerra veio a pôr à prova as suas ideias. Mas havemos de reconhecer que a função social da ciência era diminuta até aos tempos da 2ª Grande Guerra.

Quando em 1939 Bernal publica “*The Social Function of Science*” [5], o autor reconhecia que «a Ciência, à época, não estava a trabalhar ao máximo ao serviço do homem». «A ciência já não podia ser um divertimento intelectual de índole individualista, em pessoas abastadas ou mentes engenhosas apoiadas por mecenas, nem podia ser aplicada para inventar novas armas e meios ainda mais destrutivos, como a guerra química da 1ª Grande Guerra, ou ser um mero desperdício das energias do homem. O campo da saúde e do bem-estar tinha sido, em muito, ignorado pela ciência, o que havia levado a um desenvolvimento muito desigual das diferentes ciências, mormente da física e da química, em detrimento das ciências biológicas e das da vida» [6].

A ciência já não podia ser uma atividade civil descoordenada, mas teria de ser uma atividade com uma coordenação do Estado, e disso se apercebeu o regime soviético antes dos países ocidentais. Não que no passado, como na Era dos Descobrimentos, tais responsabilidades não tivessem sido exercidas pelo Estado, mas eram tempos longínquos e que haviam conduzido também a declínios e crises. Em suma, a ciência teria de ter uma *função social*, associando-a mais à agricultura, à indústria e à saúde [7].

Na emergência deste novo desiderato, marcadamente após a 2ª Grande Guerra, a Química vai surgir desagregada em subdisciplinas, como uma *ciência de serviço*. A química está em toda a parte no mundo que nos rodeia – naquilo que comemos, no que nós respiramos, na maneira como vivemos, e naquilo que somos. Os químicos não só estudam como as “coisas” são, mas também o que fazem e como o fazem, a partir de partículas subatómicas, essencialmente eletrões e prótons, até aos grandes conjuntos de moléculas.

A química é também muito criativa: produz novas substâncias todos os

dias, numa constante busca por novos materiais, novos medicamentos e novas formas de fazer as coisas melhor, com menos gastos de reagentes e de átomos, de energia, de tempo de preparação e impactos cada vez menores no ambiente, bem como na busca de novos modos de compreensão de como a Natureza funciona.

Há 50 anos deu-se uma revolução na Biologia que a uniu à Química. A biologia transformou-se numa ciência de base química com a descoberta da estrutura da dupla hélice do DNA por James Watson e Francis Crick. A química é das ciências mais rigorosas, porque se baseia não só no rigor lógico-matemático, como no ultra rigor do confronto com a realidade experimental. A precisão e o rigor experimental algemam os químicos; não é, pois, uma ciência de índole especulativa. Mas com o desvelar da estrutura do DNA, a Química tornou-se verdadeiramente a *ciência central* no contexto e hierarquia de todas as ciências, pois a ela se tem sempre de recorrer para estudar os fenómenos biológicos, físicos, médicos e do meio ambiente, bem como os da engenharia dos materiais e da nanotecnologia. Uma nanociência que se está a construir a partir da química, mas que se antecipa no final poder vir a ter uma enorme importância, com inúmeras aplicações.

#### ISOLAMENTO CIENTÍFICO: “A MORTE DO HOMEM DE CIÊNCIA”

Debrucemo-nos, por momento, no abrangente trabalho de Nunes dos Santos sobre a Química Orgânica do século XIX, no que ao nosso país diz respeito. «Quando, em 1861, o Embaixador em Paris Conde de Lavradio, a pedido do Duque de Loulé, então Presidente do Conselho de Ministros do Reino, influenciava [Agostinho Vicente] Lourenço a regressar a Portugal e a ocupar a Cátedra de Química que a jubilação de Júlio Máximo d’Oliveira Pimentel, bacharel em Matemática, militar, “professor de Química intimado pela disciplina”, deixaria livre, dificilmente poderia imaginar que as práticas orientadoras da *école* donde provinha – a investigação e a utilização do Laboratório para prosseguir o treino e o ensino dos iniciados – iriam

ser diminuídas. Na verdade, Agostinho Lourenço, após o seu regresso, reduz drasticamente a sua ação na investigação, a atestar o pequeno número de trabalhos que publica até à sua morte, apenas três [...]. O impacto das suas lições também não foi notável, como o demonstram as palavras de Eduardo Burnay na oração fúnebre [...]: “Discursar não era, ao contrário, o dom natural de Lourenço, em quem a dificuldade se agravava pela tantas vezes irresistível confusão da língua pátria com o idioma francez, que lhe era especialmente *sympathico* e com o qual quasi exclusivamente se familiarizara na sua estada em França”. Que diferença se a compararmos com as palavras de Gautier acerca das aulas do mestre de Lourenço, Adolphe Wurtz: “As suas aulas estavam cheias e o ensino de Wurtz era de grande entusiasmo e ‘performances’ exuberantes. Wurtz prendia logo à partida o seu auditório pelo charme do seu discurso, a clareza das suas palavras, a cor das suas imagens, a elegância das suas demonstrações, mas sobretudo pela convicção que emanava da sua pessoa”» [8].

Agostinho Lourenço era contudo um sagacíssimo espírito, com «grande instrução e educação química». «Lourenço era estimado na comunidade dos químicos de então, e, a par com Roberto Duarte Silva, já mencionado, constituíam as figuras portuguesas mais proeminentes da Química do século XIX» [9].

«Lourenço regressou a Portugal apesar das recomendações do químico Malagutti, seu amigo, que profetizava o seu isolamento, e vaticinava que este “é a morte do homem de ciência”. Embora o professor da Escola Polytechnica e sócio da Academia das Ciências de Lisboa continuasse a ir com regularidade a França e fosse membro correspondente do corpo Editorial do *Bulletin de la Société Chimique*, juntamente com o espanhol Ramon Luna, o italiano Agostinho Frappolli e o russo V. Sawitsch, todos *élèves* de Wurtz, o que lhe permitia estar em contacto direto com os trabalhos dos *savants* da época [...] o facto é que, Lourenço, entregue a uma atividade industrial, a exploração do estabelecimento dos “banhos sulfúreos” de S. Paulo, e ao

seu *hobby* de colecionador de arte, não ativou o Laboratório da Polytechnica, falhando assim na missão de ser o átomo “primevo” da formação de uma escola portuguesa; ele não deixou florescer o germe de que vinha imbuído da *école* de Wurtz» [10].

Prossigamos na análise de Nunes dos Santos sobre o percurso de Agostinho Lourenço em Lisboa. «É sempre difícil para o historiador da ciência analisar o impacto de transmissão de conhecimento, o *corpus* das ideias que um cientista transmite durante o processo de instrução, se não existir um programa de investigação, se não se conhecerem os sistemas de aprendizagem e de difusão do conhecimento. Embora Lourenço tivesse trabalhado num grupo de investigação com uma grande atividade científica e dispusesse de um laboratório na Escola Polytechnica, que no dizer de Hoffmann, em carta enviada a José Júlio Rodrigues, não hesitava em afirmar que não conhecia um laboratório “mieux installé pour l’enseignement et pour la recherche, em que as salas de trabalho e o auditório possuíam uma profusão de espaço, de ar e de luz que não encontrava noutros lugares”, na verdade este cientista não soube criar em Portugal um grupo de investigadores que desse continuidade e desenvolvesse o seu trabalho iniciado em França. [...] Que razões teriam levado Lourenço a não fundar uma comunidade de aprendizes e mestres, uma *escola*, que é lugar privilegiado da inovação conceptual? Porque não conseguiu ele ser o guia que oferece linhas orientadoras, que reformula a estrutura de uma disciplina, que gera o entusiasmo e a inspiração de muitos jovens? Porque não se impôs como mentor carismático, ele que já tinha reputação internacional? Porque não foi dinamizador de técnicas experimentais, e de um novo estilo a perpetuar na escola portuguesa? Porque não quis ser uma personalidade com um papel na emergência e continuidade das ideias científicas conducentes a uma visão programática que abalasse o ambiente científico português, individual e institucional dessa época?» [11] Nunes dos Santos proporciona-nos algumas respostas plausíveis, mas entendendo a mais profunda ser a intuição preditiva de Malagutti.

## UM INDICADOR DE MODERNIDADE PARA A QUÍMICA PORTUGUESA NO SÉCULO XX

A investigação científica em Portugal começou a ser financiada de forma mais ou menos regular a partir de 1929, com a criação da Junta de Educação Nacional, criada por decreto de 16 de janeiro de 1929. «Surgia como um organismo permanente e autónomo, integrado no Ministério da Instrução Pública. Como missão, são-lhe cometidas as funções, entre outras, de: fundar, melhorar ou subsidiar instituições destinadas a trabalhos de investigação e propaganda científica, organizar e fiscalizar um serviço de bolsas de estudo; promover o intercâmbio cultural, a expansão da cultura portuguesa». Com a passagem do tempo e a alteração dos contextos políticos, económicos, sociais, a Junta de Educação Nacional foi «transformada em Instituto para a Alta Cultura, mantendo-se como tal entre 1936 e 1952, quando a sua designação foi alterada para Instituto de Alta Cultura» [12]. Este instituto foi posteriormente extinto para dar lugar ao Instituto Nacional de Investigação Científica em 1977.

É neste contexto nacional que a Universidade de Coimbra, mediante proposta do diretor do *Laboratorio Chimico*, Egas Ferreira Pinto Basto, enviou, em janeiro de 1931, o assistente de química António Jorge Andrade de Gouveia preparar o seu doutoramento na Universidade de Liverpool em Inglaterra. Esta estadia prolongou-se até julho de 1934, tendo Andrade de Gouveia apresentado a sua tese de doutoramento à Universidade de Liverpool em abril do mesmo ano, com o título “*Contributions to the study of the rôle of the double bond in the absorption spectra of organic compounds*”.

Mesmo em química, campo no qual, como refere John Ziman, o projeto de investigação típico era de um único pesquisador auxiliado por instrumentos sofisticados, a autoria múltipla começou a ocorrer [13]. Por 1900, o número de artigos de um só autor já correspondia a cerca de 82% da produção, para alcançar os 65% por 1940, e se situar em cerca de 15% quando extrapolado para 1970.

Uma contagem da autoria nos artigos das revistas das “Sociedades de Química” apresenta-se na Tabela 1 no primeiro biénio após o seu surgimento e em alguns biénios posteriores. Como era reduzido o número de colaboradores regulares da “Revista de Química”, não ultrapassava a dúzia, e cerca de um terço dos artigos tinha a autoria de Ferreira da Silva [14], não causa surpresa o acentuado declínio que se verifica na Revista após o falecimento deste eminente químico português. No período de 1936/37, quase uma década após o falecimento de Ferreira da Silva, o grande obreiro da Revista e da Sociedade de Química em Portugal, o número de artigos publicados vê-se reduzido por fator de 6,5 vezes. No biénio 1968/69 o ritmo de publicação já é aceitável, para uma comunidade que ainda não tinha visto os frutos da primeira geração de doutorados que havia mandado preparar com regularidade em universidades estrangeiras. Portanto, durante mais de meio século que decorre após a fundação da *Sociedade Chimica Portuguesa*, a química nacional situa-se longe deste indicador de modernidade para o século XX, fruto de uma investigação prosseguida por «equipas de investigação».

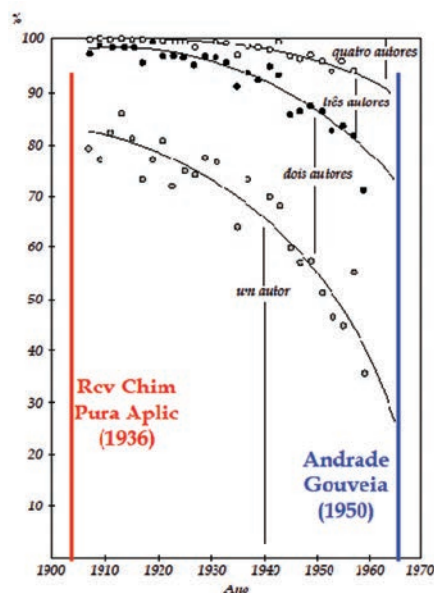
É só com António Jorge Andrade de Gouveia, que estabelece uma rede

**Tabela 1** – Contagem do número de autores nos artigos das revistas de química das “sociedades científicas” de química em Portugal e de A. J. Andrade de Gouveia

	período	nº autores				Total artigos
		1	2	3	≥4	
Revista de Chimica Pura e Aplicada	1905-1906	95,2%	4,8%			104
	1936-1937	87,5%	12,5%			16
Revista Portuguesa de Química	1968-1969	41,0%	45,0%	10,0%	4,0%	51
A. J. Andrade de Gouveia	1930-1950	25,0%	35,0%	35,0%	5,0%	20
	1930-1970	17,3%	32,7%	36,5%	13,5%	52



de colaboradores científicos, que o panorama da química nacional vai mudar na Universidade de Coimbra e seguidamente em todo o país. Trata-se já de passada segura no período de institucionalização da investigação científica da química em Coimbra, que Redinha situa já na segunda década do século XX [15]. Andrade de Gouveia regista no seu *curriculum vitae* publicações regulares em química – largamente em temas de determinações quantitativas de moléculas orgânicas por espectrofotometria –, de 1930 a 1976 num total de 52 artigos; de autoria única são tão-só 17% (Tabela 1) [16]. A Figura 1 patenteia bem a modernidade da carreira deste químico no panorama português. Em 1950, os artigos de único autor já representavam somente 25% do total, enquanto na comunidade internacional em 1950 esse valor rondava os 55%. Esta realidade situa Andrade de Gouveia cerca de 15 anos à frente do panorama médio internacional. Por contraste, o panorama dos artigos publicados na *Revista de Chimica Pura e Applicada* em 1936/37 coloca a comunidade dos químicos portugueses cerca de 33 anos atrás do panorama internacional.



**Figura 1** – Incidência da autoria múltipla de artigos em química a nível internacional entre 1900 e 1970 e de artigos publicados na *Revista de Chimica Pura e Applicada* no biénio 1936-1937, bem como do químico português A. J. Andrade de Gouveia a meio da sua carreira científica em 1950. Figura adaptada da Fig. 9.32 em John Ziman, *The Force of Knowledge. The scientific dimension of society*, Cambridge Univ Press, Cambridge, 1976, p. 237

Artigos de quatro autores na comunidade internacional alcançavam os 10% por volta de 1965, mas no final da carreira universitária ativa de Andrade de Gouveia, em 1976, este tipo de artigo já representava no seu curriculum 13,5%.

Andrade Gouveia, para além do cargo de Diretor do Laboratório de Química, que exerceu sem interrupção de dezembro de 1945 até à sua jubilação em 1976, foi Secretário da Faculdade de Ciências de 1944 a 1947, Diretor da mesma Faculdade a partir de 17 de março de 1960 até ser nomeado Reitor da Universidade de Coimbra, em 14 de junho de 1963, cargo que exerceu até fevereiro de 1970. Apesar deste intensa atividade de gestão universitária, Andrade Gouveia teve o engenho de não se deixar isolar cientificamente, ao agregar discípulos à investigação que coordenava. E tal como Agostinho Lourenço, Andrade Gouveia tinha um *hobby* – o dos pombos-correio, com diversos prémios conquistados. Em contraste com os seus antecessores na Química de Coimbra, «consciencializou-se da ciência como empreendimento coletivo e não individual», e se não prosseguiu um verdadeiro programa de investigação, profissionalizou os seus colaboradores já num ambiente nacional com suficiente massa crítica de químicos para dispor de uma sociedade científica com uma revista de química portuguesa.

Cerca de 75 anos medeiam entre as atividades de investigação regulares em Portugal destes dois químicos orgânicos portugueses. A partir de Andrade Gouveia o panorama da química portuguesa não retrocedeu na modernidade da sua investigação, pois surgiram novas levas de químicos nas diferentes universidades portuguesas, nomeadamente em Lisboa, Coimbra e Porto, que asseguraram a existência de uma massa crítica de doutorados. O facto de o “Instituto Superior Técnico” ter aderido na química a este esquema de formação doutoral do seu corpo académico, foi determinante para a sustentabilidade desta medida. A química sobreviveu sem profundos danos à miopia perseguidora do regime salazarista. Carlos Fiolhais e Décio Martins na sua *Breve História da*

*Ciência em Portugal* abordam a ciência no Estado Novo. Como realçam, «os anos 40 viram, porém, uma das páginas mais negras da história da ciência em Portugal. Foram alvo nessa altura de perseguição política alguns dos melhores cientistas portugueses» [17]. Impressiona que dos *dezassete* nomes que a obra destaca, *oito* hajam sido alvo de demissões compulsivas e expulsão do ensino. Nesse tempo, o regime não demonstrava apreço pela ciência. Mas «pese embora as purgas, o Estado Novo proporcionou nos anos 50 e 60 alguma afirmação da ciência e da técnica, nomeadamente, para além do progresso proporcionado por professores que não foram exilados» [18].

A área científica que entre nós estava mais desenvolvida, pois era a que a nível universitário tinha uma componente prática intensa bem antes da Reforma Pombalina, era a Medicina. Entre nós, a Universidade de Lisboa alcança um período de ouro, graças à sua Faculdade de Medicina. Dos cinco artigos publicados por esta universidade, e registados no *Web of Knowledge* [19] na década de 1935-1944 com a afiliação de “Portugal”, quatro são de medicina e nele figura o que valeu a atribuição do Prémio Nobel a Egas Moniz. Com o desmantelamento da Faculdade de Medicina de Lisboa e a perseguição política a professores universitários, a Universidade de Lisboa esteve sem publicar em revistas do *Web of Knowledge* de 1942 a 1966 (24 anos, exatamente o período de uma geração e vem a fazê-lo em domínios da Física); a Faculdade de Medicina de Lisboa só volta a publicar em 1972 (30 anos depois) [20].

## O RANKING DA QUÍMICA PORTUGUESA NO ANO DE 2011

É altura de irmos a abandonar o percurso histórico que percorremos para, de forma breve, atentarmos no patamar que a academização e profissionalização dos químicos em Portugal promovida pela SPQ nos permitiu alcançar no presente. Das 22 áreas científicas do ESI, em Portugal a “Química” é, em 2011, a área do topo em termos de número de *artigos* e, com maior significado, em termos de número de *citações* (default de ESI);

seguem-se a “Medicina Clínica” e a “Física” (ver Tabela 2). A nível mundial em “Química”, entre 94 países, Portugal, ocupa o 24º lugar em número de artigos, o 29º em citações e o 30º em citações/artigo (ESI julho 2011).

A Tabela 3 apresenta-nos o panorama dos temas cultivados na química nacional no ano da celebração do 1º Centenário da SPQ e que deve ser confrontada com a da Tabela 1 publicada na Parte-II deste série de trabalhos, uma compilação dos artigos de química publicados na revista *O Instituto* entre 1852 e 1952. Na química portuguesa, a temática que agora prepondera é a de Química-Física, o dobro da Química Analítica, dominante até meados do século XX.

Em 2007 Wren *et al.* estudaram a evolução da frequência de distribuição do número de autores por trabalhos publicados desde 1966, onde 86% são artigos científicos correntes [21]. O gráfico ilustrado na Figura 2 foi obtido a partir da bibliografia apresentada em MEDLINE com um limite superior de autores por trabalho fixado em 15. Este estudo indica-nos que a evolução do número de autores por artigo permanece como um *indicador* da evolução dos modos de fazer ciência durante todo o século XX.

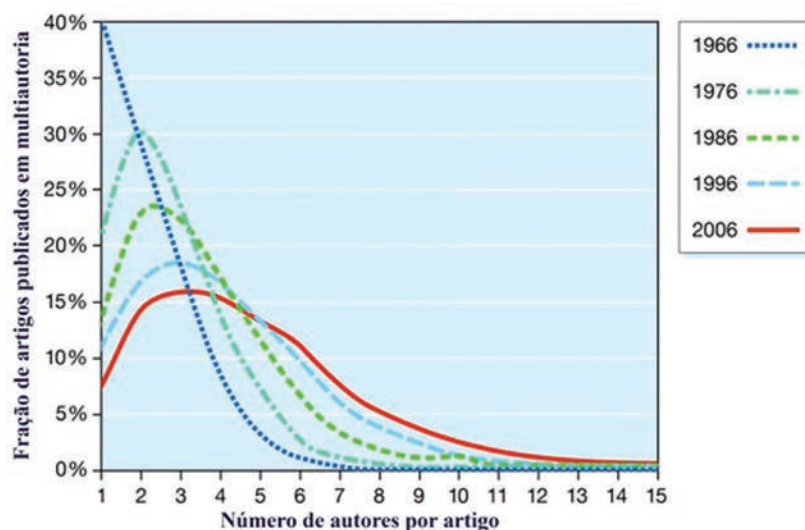
O último *buzz-word* (“Innovation Union” (IU)) de Bruxelas é aparentemente equacionar a “excelência” em ciência com mobilidade e intercâmbio de investigadores. Uma medida imprudente, pois uma cada vez mais forte globalização social da ciência criará comunidades mais fortes na geração de *consensos* nas suas convicções e paradigmas e ainda mais resistente à *inovação* fora dos paradigmas vigentes, à *ciência extraordinária* na lingua-

**Tabela 2** – Desempenho das três melhores áreas científicas de Portugal em 2011, expresso em termos da fração do total de artigos e de citações num período de cerca de 10 anos anterior a julho de 2011. Dados ESI julho 2011, cobrindo um período de 10 anos e 4 meses entre 1 de janeiro de 2011 e 30 de abril de 2011

Áreas científicas	artigos	citações
Química	15,0 %	16,1 %
Medicina Clínica	11,3 %	15,3 %
Física	9,7 %	10,7 %

**Tabela 3** – Compilação dos artigos de química publicados com a afiliação “Portugal” e registado no *ISI Web of Knowledge* no ano 2010 e 2011 até 28 de junho de 2011

Temas de química	Artigos	Fração (%)
<i>Chemistry, Physical</i>	868	30,1
<i>Chemistry, Multidisciplinary</i>	501	17,4
<i>Chemistry, Analytical</i>	402	13,9
<i>Chemistry, Applied</i>	286	9,9
<i>Chemistry, Organic</i>	268	9,3
<i>Electrochemistry</i>	154	5,3
<i>Chemistry, Medicinal</i>	212	7,3
<i>Chemistry, Inorganic &amp; Nuclear</i>	197	6,8



**Figura 2** – Frequência de distribuição do número de autores por trabalhos publicados desde 1966 em MEDLINE (Wren *et al.*, *EMBO Rep.*, 8(11) (2007 Nov) 988-91)

gem de Kuhn. Claro que conduzirá a uma ciência com um maior número de citações, mas um tal indicador não é necessariamente uma medida da excelência.

Em retrospectiva, bem podemos avaliar quanto longe se foi desde os “Gabinetes de Curiosidades” até aos nossos dias. A *curiosidade* é um estímulo cognitivo mas também uma estratégia de sobrevivência para o ser humano, que se prolonga por toda a nossa vida – *a burning curiosity, a tormenting need to know* [22]. E propicia-nos um «gozo intelectual», o estímulo mais relevante para todo o ato de conhecer, e muito em particular conhecer o novo, quer na observação, quer na compreensão. Interroga-se Jorge Wagensberg: «¿Que papel desempeña el gozo intelectual? El gozo intelectual quizá sea un logro de la selección natural en favor de la selección cultural, la pieza precisa y preciosa que hace posible el tránsito de una a la otra» [23]. Mas

esconder as *contradições* em ciência é ocultar o *estímulo*, e este é mais um risco da busca de uma “excelência” baseada no fomento da mobilidade e no intercâmbio de cientistas.

## INOVAÇÃO, CRIATIVIDADE E CULTURA

A revista científica *Nature* vem dedicando alguns dos seus editoriais ao tema da *inovação*, que faz refletir na sociedade e na economia descobertas científicas e tecnológicas convertidas em novos produtos ou serviços. Um desses editoriais acentua que a *inovação* é um «ecossistema complexo» e que o modelo de um *desenvolvimento linear* – assente numa investigação em ciência básica, que se converte em aplicada, depois em desenvolvimento e que dele surge uma ideia relevante com valor para o mercado, a que se segue a fase de comercialização e difusão do produto ou serviço inovador – é extraordinariamente simplificado; ignora o papel desempe-

nhado pelo *design*, pela *manufatura* e pelo *negócio* [24]. E a verdade é que o modelo de um *desenvolvimento linear* para a inovação tende a dar aos decisores políticos a impressão de que a inovação é muito mais previsível e controlável do que realmente é. A observação comum é a de que algumas *culturas* parecem ser particularmente produtivas e recetivas no que diz respeito à inovação e outras culturas não o são.

Richard Florida vem demonstrar que há fatores determinantes para explicar o sucesso/insucesso dos *clusters* regionais de inovação: *talento*, *tecnologia* e *tolerância*, os “3 T’s” de Florida [25]. O mesmo autor em artigo no “*The Atlantic Monthly*” em 2005, vem argumentar que «*the world is spiky*»; o mundo não é plano mas proporciona-nos uma paisagem com um apreciável número de *picos*, *colinas* e *vales* para o desenvolvimento e a inovação. Florida revela que tais “*picos*”, a respeito do número de *patentes* e de *citações* científicas, se acumulam em certas cidades [26]. Nas patentes são notórios os picos em cidades do Japão, Coreia do Sul, zona Leste dos Estados Unidos e mesmo no Oeste, países do Centro da Europa, Xangai, na China, e Hong Kong.

Assim, nesta linha procura encontrar “ambientes criativos” e estabelecer *índices de criatividade*. As regiões e cidades mais tolerantes atraem *ideias*, *peças* e *capital*. Certas cidades ficaram atrativas para a “inovação” e nelas as universidades são os seus “nós de criatividade”. O *locus* da competitividade é muito mais a cidade/região do que o país [27]. Se os picos mundiais são mais acentuados para as patentes do que para as citações ou para os artigos, eles verificam-se claramente a nível de publicações. Neste campo as *Top 20* cidades mundiais em 2004-2008 são: na Europa – Berlin, London, Madrid, Moscow, Paris, Rome; América do Norte – Boston, Los Angeles, New York, Philadelphia, Toronto, Washington D. C.; América do Sul – São Paulo; Ásia – Beijing, Hong Kong, Nanjing, Seoul, Shanghai, Taipei, Tokyo [28]. Atente-se que a cidade de São Paulo subiu 21 lugares no *ranking* na última década.

Numa visão bem mais recuada no tempo, o positivismo construiu-se a partir da perspectiva cartesiana de que todo o conhecimento científico é conhecimento explícito, e que o «homem-máquina» consegue erguer-se a um ponto arquimediano acima do mundo onde vive para exercer os seus juízos críticos e ajuizamentos. Daí a visão de uma ciência que é *independente das culturas* onde é realizada. E a generalidade dos cientistas e do cidadão comum tem sido dominada por estas ideias aprofundadas no campo da filosofia pelo positivismo do século XIX e o neopositivismo do século XX. Contudo, tal contrasta com o entendimento que se dispõe a respeito da influência das culturas na inovação. Há que conciliar as duas perspetivas, porque a ciência é indiscutivelmente a base da inovação tecnológica, que começou com a síntese da mauveína por William Perkin em 1856, na altura um jovem de 18 anos. Porém, uma tal conciliação é tarefa que requer algum espaço editorial e remetemo-la para a Parte-IV desta série de trabalhos, nos quais se baseou a minha conferência sobre os 100 Anos da Sociedade Portuguesa de Química no seu XXII Encontro Nacional em Braga.

## REFERÊNCIAS

- [1] G. Aad *et al.*, “Search for New Particles in Two-Jet Final States in 7 TeV Proton-Proton Collisions with the ATLAS Detector at the LHC”, *Physical Review Letters*, **105** (2010) 161801.
- [2] *Knowledge, networks and nations. Global scientific collaboration in the 21st century*, The Royal Society, London (2011) 48.
- [3] D.J. de Solla Price, *Little Science, Big Science*, Columbia Univ. Press, New York, 1963; reimpressão em 1986.
- [4] de Solla Price, *ob. cit.*
- [5] J.D. Bernal, *The Social Function of Science*, George Routledge & Sons Ltd., London, 1939.
- [6] S. Formosinho, *Nos Bastidores da Ciência. 20 Anos Depois*, Imprensa da Universidade de Coimbra, Coimbra (2007) 59-60.
- [7] Bernal, *ob. cit.*, p. 11.
- [8] A.M.N. Santos, “Agostinho Vicente Lourenço e a Química Orgânica do Séc. XIX”, *Colóquio/Ciências*, nº 15, 83-102 (setembro 1994) 97-87.
- [9] *Idem*, p. 98.
- [10] *Idem*, p. 100.
- [11] *Idem*, p.101.
- [12] <http://www.instituto-camoes.pt/noticias-ic-portugal/da-junta-de-educacao-nacional-ao-instituto-camoes-80-anos-de-historia-em-exposicao.html> (acedido 28-04-2011).
- [13] J. Ziman, *The Force of Knowledge. The scientific dimension of society*, Cambridge Univ Press, Cambridge (1976) 237.
- [14] V. Leitão, A. Carneiro e A. Simões, “Portugal: Tackling a Complex Chemical Equation: The Portuguese Society of Chemistry, 1911-1926”, em A.K. Nielsen e Soňa Štrbáňová, *Creating Networks in Chemistry. The Founding and Early History of Chemical Societies in Europe*, RSCPublishing, Cambridge (2008) 263-264.
- [15] J.S. Redinha, Bosquejo Histórico da Química na Universidade de Coimbra”, *Rev. Port. Quim.*, **29** (1987) 140-150.
- [16] Não foram contabilizados os relatórios, nem os 9 artigos publicados a partir de 1976 em domínios da história da química que são sempre de autor único.
- [17] C. Fiolhais e D. Martins, *Breve História da Ciência em Portugal*, Gradiva/Imprensa da Universidade de Coimbra, Coimbra (2010) 103-110.
- [18] *Id.*, p. 110.
- [19] Esta base de dados tem uma limitação, a de só permitir a consulta de artigos que indiquem a morada dos seus autores. Em algumas publicações só figura a casa editora (*Publisher*), ao modo de como se citam os livros, mas que os filtros atuais não selecionam. Esta limitação parece particularmente notória de 1945 a 1970.
- [20] S.J. Formosinho, “Repensar o paradigma científico”, em publicação.
- [21] J.D. Wren, K.Z. Kozak, K.R. Johnson, S.J. Deakynne, L.M. Schilling, R.P. Dellavalle, “The write position. A survey of perceived contributions to papers based on byline position and number of authors”, *EMBO Rep.*, **8** (2007) 988-91. Disponível em <http://brainvat.wordpress.com/2007/12/02/too-many-authors-spoil-the-credit> (acedido em 2-07-2011).
- [22] *Knowledge, networks and nations. Global scientific collaboration in the 21st century*, p. 34.
- [23] J. Wagensberg, *El Gozo Intelectual. Teoría y práctica sobre la inteligibili-*



- dad et la belleza*, TusQuets Editores, 2ª ed., Barcelona (2008) 43.
- [24] "Innovation is a complex ecosystem that requires careful cultivation", *Nature*, **454** (2008) 918.
- [25] R. Florida, "The Rise of the Creative Class: And How it's transforming work, leisure, community and everyday life", Perseus Book Group, New York, 2002.
- [26] R. Florida, "The World is Spiky", *The Atlantic Monthly*, October 2005, pp. 48-51; disponível em <http://www.creativeclass.com/rfcgdb/articles/other-2005-The%20World%20is%20Spiky.pdf> (acedido em 23-10-2010).
- [27] R. Florida e I. Tinagli, "Europe in the Creative Age", Carnegie Mellon e DEMOS (fevereiro 2004) 5; em <http://www.inthekzone.com/pdfs/Florida%20Study%20-%20EUCIfinal.pdf> (acedido em 23-10-2010), p. 10.
- [28] *Knowledge, networks and nations. Global scientific collaboration in the 21st century*, p. 38.

## ATUALIDADE CIENTÍFICA

### LIGAÇÕES COVALENTES REVERSÍVEIS

Jack Taunton da University of California, em San Francisco, e colaboradores, reportam que o direcionamento reversível de resíduos de cisteína não catalíticos pode conduzir ao desenvolvimento de moléculas farmacêuticas covalentes de potência e seletividade melhoradas, mas com um menor potencial para a formação de aductos indesejáveis (off-target) (*Nat. Chem. Biol.*, DOI: 10.1038/nchembio.925). Assim, os investigadores afirmam que esta estratégia poderá levar ao desenvolvimento de medicamentos mais seguros.

Vários inibidores baseados em acrilamida que se ligam de modo covalente a resíduos não catalíticos de cisteína em quinases estão em desenvolvimento para o tratamento de cancro. No entanto, estes inibidores têm potencial para formar aductos irreversíveis com glutatona e outros tióis, o que pode suscitar preocupações de segurança.

Na esperança de reduzir a formação destes aductos off-target, a equipa de Taunton construiu inibidores que possuem dois grupos captadores de eletrões para reações de adição de Michael. Devido à sua natureza dual, estes novos inibidores ligam-se à proteína cisteína mais rapidamente do que os disponíveis anteriormente, que apenas possuem um grupo de ativação. No entanto, segundo Taunton, a reação inversa é igualmente rápida.

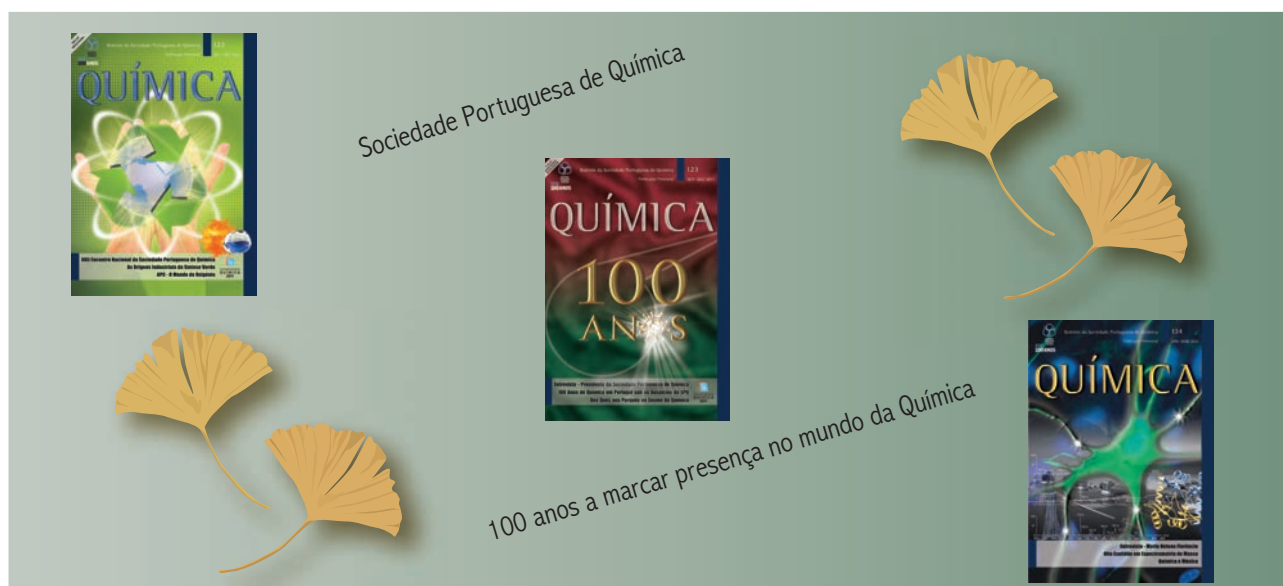
Taunton afirma, "através do aumento da reatividade intrínseca do eletrófilo, entra-se num regime cinético no qual ambas as reações direta e inversa são muito rápidas". Apesar da velocidade elevada da reação inversa, os novos inibidores formam complexos estáveis com as suas proteínas alvo, devido a uma rede de interações específicas entre o inibidor e a proteína. Ao contrário, às cisteínas off-target faltam estas interações estabilizantes e a rapidez da reação inversa impede a formação de aductos permanentes.

Como caso de teste, Taunton e colaboradores sintetizaram inibidores para um dos domínios de uma quinase designado por RSK2 e direcionaram uma cisteína para o centro ativo da enzima.

Kendall N. Houk, professor de Química na University of California, Los Angeles, classifica este trabalho como "um interessante exemplo de como a compreensão da cinética e da termodinâmica pode conduzir a consequências práticas no campo do design de medicamentos".

(adaptado do artigo de 09/04/2012 de Celia Henry Arnaud: Covalent Ties Reversed *Chemical & Engineering News* – <http://cen.acs.org/articles/90/i15/Covalent-Ties-Reversed.html>)

**Paulo Brito** (paulo@ipb.pt)  
Instituto Politécnico de Bragança



# Made in Europe for the World

- Full Papers
- Short Communications
- Microreviews

## European Journal of Inorganic Chemistry

- Inorganic ● Organometallic ● Bioinorganic
- Solid-state Chemistry ● Nanochemistry

[www.eurjic.org](http://www.eurjic.org)

## European Journal of Organic Chemistry

- Synthetic Organic ● Bioorganic
- Physical-organic chemistry

[www.eurjoc.org](http://www.eurjoc.org)

ChemPubSoc  
Europe

A consortium of 16 European Chemical Societies



\*2010 Journal Citation Reports® (Thomson Reuters, 2011)

**SUBSCRIBE NOW!**

To subscribe or to order a free sample copy,  
please send an email to:

- [cs-journals@wiley.com](mailto:cs-journals@wiley.com)  
(Americas, Europe/Middle East/Africa/Asia Pacific)
- [cs-journals@wiley.com](mailto:cs-journals@wiley.com) (Germany/Austria/Switzerland)
- [cs-japan@wiley.com](mailto:cs-japan@wiley.com) (Japan)

 WILEY-VCH

PS-12-39204-01



## O VERDE QUE NÃO ERA ESPERANÇA

JOÃO PAULO ANDRÉ\*

O arsenito de cobre, obtido originalmente há quase 240 anos, e popularizado sob o nome de “verde de Scheele”, ainda hoje é um tema que suscita interrogações quanto ao curso das aplicações que a sociedade emergente da revolução industrial lhe reservou, as quais estiveram na origem de um fenómeno de intoxicação com arsénio à escala global. O *design* e a moda deram-lhe grande uso; as contas bancárias de uns poucos beneficiaram muito. E os outros?

### O UBÍQUO ARSÉNIO

Se há um elemento químico que marcou a sociedade vitoriana foi sem dúvida o arsénio. Este semimetal do grupo 15 da Tabela Periódica encontrava-se omnipresente nos ambientes domésticos ao longo de grande parte do século XIX e mesmo do século XX (Figura 1).

A notícia, vinda à luz em 1851, de que os camponeses dos Alpes Estírios, na Áustria, ingeriam trióxido de arsénio, veio irremediavelmente alterar o modo como as populações, principalmente do mundo ocidental, encaravam este elemento químico, não raramente associado a casos de envenenamento. O insólito hábito Estírio já contava no entanto com alguns séculos de existência. Os seus seguidores aplicavam o trióxido de arsénio sobre o pão e o toucinho com uma frequência de 2-3 vezes por semana. Começavam cautelosamente com uma quantidade de cerca de 30 mg que progressivamente iam aumentando até aos 300-400 mg. Tal constituía um valor bastante acima daquele que, em média, é tolerável pelo ser humano (70-180 mg são normalmente fatais!). A inclusão de arsénio na dieta dava-lhes alegadamente uma compleição física e um vigor que, sem outras aparentes consequências, podiam manter-se ao longo de 30-40 anos [1]. A questão dos “comedores de arsénio” gerou na época uma grande discussão [2]. No

século XIX, apesar de muitos verem o arsénio como uma panaceia para vários males (podia até ser adquirido nas farmácias sob a forma de soluções que eram tomadas às gotas), houve também quem se recusasse a acreditar nas “proezas” dos camponeses Estírios. Globalmente, todavia, saiu reforçada a convicção de que o arsénio era como um elixir que podia

beneficiar a saúde. Afinal não servia só para matar os ratos ou acelerar a receção de uma herança que tardava! Daí ao aparecimento de produtos de cosmética baseados neste elemento foi um pequeno passo. A publicidade não era tímida em lhes atribuir propriedades como as de remover rugas, conferir boa cor, dar brilho aos olhos e de elevar o espírito (Figura 2).



Figura 1 – “A Era das Drogas”, ilustração de 1900, da revista humorística americana *Puck*, que denunciava como os venenos eram de fácil aquisição nas farmácias; tarefa que até uma criança podia realizar. Podem ver-se sobre o balcão frascos e embalagens de trióxido de arsénio, estircina, ópio e cocaína, entre outros. (<http://imagespublicdomain.wordpress.com/tag/puck/>)

Figura 2 – Anúncio de 1896 realçando as vantagens estéticas de usar produtos contendo arsénio

\* Departamento/Centro de Química, Universidade do Minho, Campus de Gualtar - 4710-057 Braga  
E-mail: jandre@quimica.uminho.pt



## ARSÊNIO NA MEDICINA

A elevada toxicidade deste elemento advém essencialmente da grande afinidade do As(III) para biomoléculas com grupos tiol. A possibilidade de o arsénio poder substituir o fósforo em processos vitais constitui atualmente um aceso foco de discussão [3]. Pese a sua toxicidade, os compostos de arsénio fazem parte da medicina tradicional chinesa desde há milhares de anos. Na Europa, o trióxido de arsénio era já usado no século XII para combater a malária. Aos sulfuretos também foram atribuídas propriedades terapêuticas: o ouro-pigmento ( $\text{As}_2\text{S}_3$ ) era bom para males como artrites, asma, malária, tuberculose, diabetes e doenças venéreas. Segundo Hipócrates (460-377 a.C.), o realgar ( $\text{As}_4\text{S}_4$ ) era adequado para o tratamento de úlceras.

Em 1786, o médico inglês Thomas Fowler publicou a composição de uma solução à base de arsenito de potássio e água de lavanda. Acreditava-se que umas gotas diárias desta solução, aplicadas na água ou no vinho, eram quanto bastava para remediar cefaleias, sífilis, dores reumáticas, epilepsia, problemas de pele, ... Em 1809, a solução de Fowler fazia já parte da Farmacopeia de Londres e permaneceu na Farmacopeia Britânica até à II Guerra Mundial [2]. Havia mesmo quem acreditasse que possuía igualmente propriedades afrodisíacas. Charles Darwin poderá ter sido vítima de envenenamento com arsénio, dado tomar regularmente a solução de Fowler para a tremura das mãos. Comumente, as pessoas que tomavam por longos períodos esta solução apresentavam alterações na pele que iam desde o seu engrossamento nas mãos e nos pés até ao desenvolvimento de cancros. A relação entre arsénio e cancro foi pela primeira vez estabelecida em 1888 pelo médico inglês Jonathan Hutchinson, mas a solução de Fowler foi usada até aos anos 50 do século XX, altura em que foi finalmente proibida.

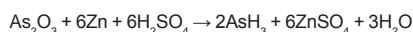
O primeiro estudo sistemático e racional do desenvolvimento de um fármaco foi levado a cabo por Paul Erlich, que veria em 1909 o seu esfor-

ço recompensado ao verificar que um composto de arsénio, com o número 606, apesar dos severos efeitos secundários, revelava ser um “milagre” para a cura da sífilis. Ficaria conhecido pelo nome comercial de *Salvarsan*. A estrutura deste organometálico só há poucos anos foi corretamente determinada; trata-se da mistura de um trímero e de um pentâmero cíclicos (Figura 3) [4].

Até ao final da década de 80 do século XX, o trióxido de arsénio foi usado na desvitalização de dentes e, já mais recentemente, foi aprovado para tratamento da leucemia promielocítica aguda [5].

## O TESTE DE MARSH

O trióxido de arsénio, de venda livre nas farmácias e droguistas do século XIX, era sobretudo utilizado para matar ratos. Contudo, sob esse pretexto, era também adquirido para usos menos lícitos. Até ao aparecimento, em 1836, de um teste específico, os autores de envenenamento criminoso com trióxido de arsénio tinham a seu favor o facto de o arsénio provocar sintomas idênticos aos da cólera, pelo que não raramente os médicos tinham dificuldade em estabelecer qual a verdadeira causa da morte. O químico britânico James Marsh desenvolveu um teste que permitia identificar o arsénio presente nos restos mortais das vítimas de envenenamento por este elemento. No teste de Marsh, que viria a tornar-se um procedimento padrão na química forense, fazia-se reagir uma amostra dos tecidos do corpo da vítima com zinco e ácido (balão A na Figura 4). A reação do trióxido de arsénio com zinco e ácido era já conhecida desde Karl Scheele:



O vapor de água e a arsina gerados passavam através de um tubo de secagem e, ao emergir, por decomposição térmica, a arsina originava arsénio na forma de um pó preto e brilhante que podia ser guardado num tubo selado e assim constituir uma prova de crime em tribunal:

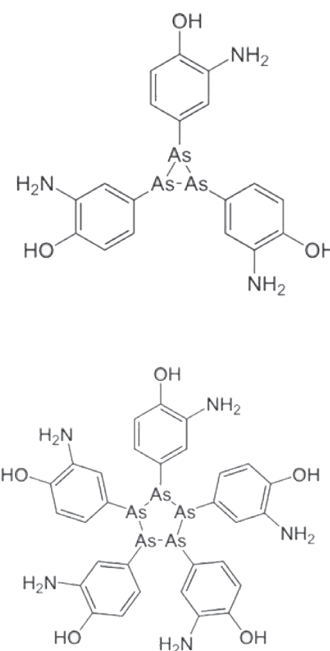
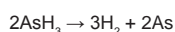


Figura 3 – Estruturas químicas do *Salvarsan*

As dimensões do espelho de arsénio formado eram diretamente proporcionais ao teor de arsénio da amostra pelo que, recorrendo a padrões de concentração de arsénio conhecida, o resultado do teste de Marsh podia ser quantitativo (permitia detetar quantidades tão pequenas quanto 0,02 mg).

## KARL SCHEELLE

Karl Wilhelm Scheele (1742-1786) foi um boticário sueco com excepcionais aptidões para a química (Figura 5). A descoberta do oxigénio (com Priestley e Lavoisier) ter-lhe-ia bastado para assegurar um lugar na história da ciência. A esta façanha

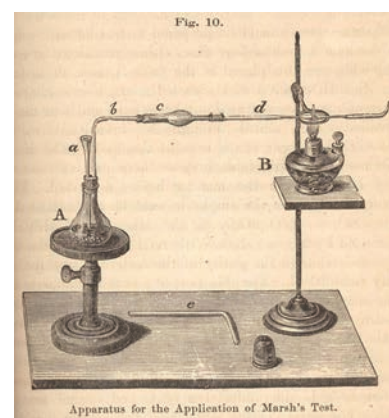


Figura 4 – Montagem experimental para o teste de Marsh.

([http://institutedoimbra.blogspot.com/2009\\_01\\_01\\_archive.html](http://institutedoimbra.blogspot.com/2009_01_01_archive.html))

haveria ainda de adicionar um longo rol de outras descobertas: mais 6 elementos químicos e vários ácidos e compostos orgânicos que preparou e identificou. No ano de 1775 produziu no seu laboratório o arsenito de cobre,  $\text{CuHAsO}_3$ , um composto de um tom verde extremamente apelativo que, para a posteridade, haveria de ficar conhecido como “verde de Scheele” (Figura 6). Três anos após a sua descoberta já este era produzido industrialmente e, no início do século XIX, artistas como Turner começaram a utilizá-lo como pigmento para os seus quadros. Seis décadas depois Manet ainda o utilizava (Figura 7). Literalmente, muita tinta faria correr, mas o auge do seu uso e da sua moda haveria de verificar-se em plena época vitoriana.

Um outro pigmento verde que recebeu as preferências de muitos foi o “verde esmeralda” ou “verde de Paris”, cuja composição foi revelada pelo químico alemão Justus von Liebig em 1822 e que consistia em acetoarsenito de cobre ( $3\text{CuO}\cdot\text{As}_2\text{O}_3\cdot\text{Cu}[\text{OOC}\cdot\text{CH}_3]$ ).

## PAPEL DE PAREDE

O “verde de Scheele” revelou-se quase desde o primeiro instante o



Figura 5 – Selo de 1942 dos Correios Suecos assinalando o bicentenário do nascimento de Karl Wilhelm Scheele. ([http://colnect.com/en/stamps/stamp/51015-Scheele\\_Carl\\_Wilhelm-Scheele\\_Carl\\_Wilhelm-Sweden](http://colnect.com/en/stamps/stamp/51015-Scheele_Carl_Wilhelm-Scheele_Carl_Wilhelm-Sweden))



Figura 6 – Verde de Scheele

pigmento ideal para colorir papéis de parede, especialmente os de motivos florais, pois para além dos seus atributos estéticos, era também barato.

Devido ao sucessivo abaixamento do preço do papel de parede (sobretudo devido à mecanização do processo de estampagem), este tornou-se gradualmente num artigo a que uma grande parte da população tinha acesso e, em Inglaterra, rara era a casa que o não exibia. A moda entretanto espalhou-se um pouco por todo o mundo. Na Inglaterra de 1870 produziram-se 30 milhões de rolos de papel de parede e quatro em cada cinco destes papéis continha arsénio [1]. As quantidades de arsénio aplicadas no papel eram enormes: habitualmente 25-35 g por metro quadrado. Uma sala que tivesse 100 m<sup>2</sup> de papel conteria 2,5 kg de arsénio. Calcula-se que em 1858 existissem 260 milhões de quilómetros quadrados de papel suspenso nas paredes das casas inglesas! [6].

As primeiras suspeitas de que o papel de parede seria responsável pela emissão de arsénio para o ar vieram de Berlim em 1815. A constatação de que as divisões húmidas forradas a papel contendo “verde de Scheele” adquiriam um odor desagradável e o facto de, provenientes de vários quadrantes, começarem a surgir notícias de indisposições e mesmo de mortes de quem dormia em quartos forrados com esse papel, levou o químico alemão Leopold Gmelin a

admitir que seria o próprio papel que libertava um gás tóxico que conteria arsénio. Na época não teve muitos seguidores nesta sua hipótese mas, na década de 60, já havia quem especulasse que o gás tóxico emanado pelo papel de parede verde pudesse ser a arsina ( $\text{AsH}_3$ ) ou mesmo a forma metilada de arsénio correspondente a  $(\text{CH}_3)_2\text{As}\text{-As}(\text{CH}_3)_2$ . Estava-se lá perto, mas a identificação correta do gás em causa só viria a ocorrer em 1932.

Apesar de todas as notícias e advertências, o negócio do papel de parede pintado com sais de cobre e arsénio continuava florescente. O arsénio era definitivamente o elemento químico da época, pois reconheciam-se-lhe tantas virtudes que era impossível acreditar-se que pudesse ser um elemento unicamente pernicioso. De resto, nos quartos de dormir, o papel verde tinha a vantagem adicional, e muito apreciada, de fazer diminuir a população de parasitas com que os proprietários das casas habitualmente partilhavam os leitos.

## WILLIAM MORRIS

William Morris (1834-1896), um dos pioneiros do movimento artístico *Arts and Crafts*, terá sido o mais famoso *designer* de papéis de parede de todos os tempos. Politicamente identificava-se com a ala de esquerda, o que aliás expressava publicamente. Devido aos seus ideais Marxistas, e ao facto de possuir uma grande fortuna,



Figura 7 – “La Musique aux Tuileries”, Edouard Manet (1862) - National Gallery (Londres) ([http://en.wikipedia.org/wiki/Music\\_in\\_the\\_Tuileries](http://en.wikipedia.org/wiki/Music_in_the_Tuileries))



vinda da exploração mineira de cobre, Morris esteve na origem de uma enorme polémica e de uma discussão que se estende até aos dias de hoje. Para tornar o quadro mais negro, utilizou sem parcimónia o “verde de Scheele” nos papéis de parede que criou (Figura 8), pigmento esse que era produzido a partir do arsénio obtido na sua mina. Quando a extração do cobre deixou de ser rentável decidiu investir na extração de arsénio, dado ser este um elemento que habitualmente contamina os minérios de cobre. Assim, Morris tornou-se no maior acionista da maior mina de arsénio do mundo e, simultaneamente, a Inglaterra tornava-se o maior utilizador mundial deste elemento.

A grande dúvida acerca de Morris é a de se estaria consciente da toxicidade do arsénio. Por outro lado, advogando uma melhor vida para todos, ter-se-á alguma vez interrogado sobre a origem da sua imensa fortuna e sobre as condições de vida dos seus trabalhadores? [7]

### O GÁS DE GOSIO

Em 1891, o químico italiano Bartolomeo Gosio decidiu empreender a decifração do mistério do gás venenoso emanado pelos papéis de parede pintados com sais de arsénio. Para o efeito, fez crescer vários micro-organismos sobre batata esmagada misturada com trióxido de arsénio, que colocava em caves húmidas. Rapidamente várias colónias de fungos e de bactérias se desenvolviam, o que era acompanhado do aparecimento de um cheiro forte a alho. Fez o mesmo



Figura 8 – Papéis de parede de William Morris (<http://morris.artpassions.net/>)

tipo de experiência utilizando “verde de Scheele” e “verde esmeralda” sobre pão bolorento, tendo notado o aparecimento do mesmo cheiro. Não havia dúvida de que a origem das intoxicações que ocorriam um pouco por toda a parte (sempre que houvesse papel de parede verde) era o gás emanado pelo próprio papel. Gosio também verificou que os ratos que colocava junto de papel verde putrefacto morriam em pouco tempo. Não tardou até que a condição clínica desenvolvida por quem respirava esse gás letal passasse a ser conhecida por “doença de Gosio”.

O gás em causa só seria corretamente identificado em 1932, pelo químico inglês Frederick Challenger; tratava-se da trimetilarsina,  $As(CH_3)_3$ . O mecanismo pelo qual alguns micro-organismos podem promover a metilação do arsénio só foi descrito em 1971 [8]. Hoje sabe-se que todos temos arsénio no corpo! Uma pessoa de 70 kg tem em média 7 mg deste elemento (0,1 ppm). No entanto, as análises feitas há alguns anos ao cabelo de Napoleão Bonaparte revelaram que este possuía um teor de arsénio muito superior. Há várias teorias quanto à causa da sua morte, nomeadamente a de que morreu envenenado por trimetilarsina! Com efeito, o papel que cobria as paredes da casa da ilha de Santa Helena, onde passou os últimos anos da sua vida, continha “verde de Scheele”.



Figura 9 – Gravura de W.S. Gilbert que acompanhava “The Bab Ballad, Only a Dancing Girl” (<http://www.gutenberg.org/files/15370/15370-h/15370-h.htm>)

### A MODA DO “VERDE DE SCHEELE”

De acordo com cálculos de 1863, anualmente seriam produzidas em Inglaterra entre 500 a 700 toneladas de “verde de Scheele” e de “verde esmeralda”, contudo nem toda esta quantidade era destinada a ser usada em papéis de parede [6]. Os verdes de arsénio eram também utilizados para tingir roupas, papel, cartão, sabão, brinquedos, tintas, velas, flores artificiais, bem como melhorar o aspeto de animais empalhados e pintar persianas, cortinas e mobiliário. Os verdes de arsénio chegaram mesmo a ser usados para colorir produtos de confeitaria!

No século XIX, os jornais diários e as revistas de medicina estavam repletos de notícias e casos de intoxicação com verdes de arsénio presentes em chitas, cretones, toalhas de mesa, *abat-jours* e meias de seda.

Os tecidos que eram usados nas roupas eram particularmente perigosos devido ao seu contacto com a pele. Os vestidos de baile de musselina, impregnados de verde de arsénio, eram tão populares que chegaram a ser ridicularizados na obra “The Bab Ballad, Only a Dancing Girl” (Figura 9), uma coletânea de poemas satíricos ilustrada por W. S. Gilbert e publicada em 1869:

*No airy fairy she,  
As she hangs in arsenic green,  
From a highly impossible tree,  
In a highly impossible scene  
(Herself not over clean).*

Num exercício de algum humor, negro é certo, é caso para questionar se a expressão “vítimas da moda” teria tido origem nesta época?!

Na opereta “Patience”, Gilbert também satirizou a moda dos papéis de parede profusamente pintados de verde:

*I do not care for dirty greens  
By any means.*

### ATUALIDADE

Segundo a Organização Mundial de Saúde, para ser potável, a água não



deve conter mais de 10 partes por bilhão em arsênio. Contudo, em várias regiões do globo, os níveis deste elemento na água são, por vezes, muito superiores.

Este problema tem assumido proporções particularmente alarmantes no Bangladesh e no estado indiano de Bengala Ocidental, onde afeta largos milhões de pessoas [6]. Nos anos 70 do século XX deu-se início, nestes estados, à captação de água de lençóis subterrâneos, o que parecia constituir uma fonte adequada de água potável em alternativa às águas contaminadas de rios e lagos causadoras de doenças como gastroenterites, febre tifoide e cólera. Estas águas de profundidade revelaram-se no entanto altamente contaminadas com arsênio proveniente de minérios locais.

Apesar do apoio de organizações como a UNICEF, os governos destas

regiões continuam permanentemente a debater-se com este gigantesco problema.

Os efeitos adversos do arsênio sobre a saúde, sejam eles agudos ou crónicos [9] estão longe de ser um problema exclusivamente do passado.

#### AGRADECIMENTOS

O autor agradece à colega Ana Paula Esteves a leitura crítica do texto.

#### REFERÊNCIAS

- [1] J. Emsley, *The Elements of Murder - A History of Poison*, Oxford University Press, Nova Iorque, 2005.
- [2] G. Przygodan, J. Feldmann, W. Cullen, *Appl. Organometal. Chem.*, 2001, 15, 457-462.
- [3] B. P. Rosen, A. A. Ajees, T. R. McDermott, *Bioessays*, 2011, 33, 350-357.

- [4] N. C. Lloyd, H. W. Morgan, B. K. Nicholson, R. S. Ronimus, *The Composition of Ehrlich's Salvarsan: Resolution of a Century-Old Debate*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2005, 44, 941-944.
- [5] S. L. Soignet, P. Maslak, Z. Y. Wang, S. Jhanwar, E. Calleja, L. D. Dardashi, D. Corso, A. DeBlasio, J. Gabrilove, D. A. Scheinberg, P. P. Pandolfi, R. P. Warrell, *N. Engl. J. Med.*, 1998, 339, 1341-1348.
- [6] A. A. Meharg, *Venomous Earth*, Macmillan, Nova Iorque, 2005.
- [7] William Morris Society Newsletter, *William Morris and arsenic - Guilty, or not proven?*, Spring 2011, 10-17.
- [8] R. Bentley, T.G. Chasteen, *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, 66, 2002, 250-271.
- [9] N. Dwivedi, A. Mehta, A. Yadav, B. K. Binukumar, K. D. Gill, S. J. S. Flora, *Toxicol. Appl Pharmacol.*, 2011, 256, 241-248.

## ATUALIDADE CIENTÍFICA

### O BRILHO DE UMA LUZ NA DETEÇÃO DE IMPRESSÕES DIGITAIS

Um grupo de cientistas na China descobriu um novo método para a revelação de impressões digitais latentes encontradas no local de um crime que, segundo os autores da descoberta, constitui um método muito simples, rápido, que não necessita de tratamento forense profissional e que não destrói a impressão digital.

Bin Su e colaboradores da Universidade de Zhejiang, Hangzhou, verificaram que o composto tetrafeniletileno (TPE) é capaz de aderir aos resíduos de gordura deixados por impressões digitais através de uma interação hidrofóbica. Quando dissolvido em acetoneitrilo, o TPE é um composto não fluorescente, mas se irradia com comprimento de onda de 365 nm incidir sobre a solução, o composto perde a energia adicional por rotação intramolecular.

No entanto, quando o TPE adere à impressão digital, as suas moléculas agregam-se. Uma vez agregadas, as moléculas de TPE perdem a sua capacidade de rotação intramolecular e, como consequência, elas libertam a energia sob a forma de luz. Este fenómeno, conhecido como emissão induzida por agregação (do inglês, "aggregation-induced emission", AIE), devido ao facto de moléculas não luminescentes serem induzidas a emitir luz por agregação, tem sido já utilizado em sensores, mas nunca como uma forma de deteção de impressões digitais.

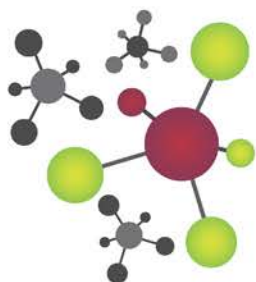
Steven Bell, um perito em investigação forense da Universidade de Queen, em Belfast, Reino Unido, é prudente na sua avaliação do procedimento: "As vantagens sobre os métodos existentes ainda precisam de ser demonstradas. Seria útil fazer uma comparação com o método padrão normalmente utilizado (o método "superglue fuming") para estabelecer a sensibilidade deste novo método".

O método atualmente usado para revelar impressões digitais latentes presentes em superfícies não porosas consiste no aquecimento de cianoacrilato líquido, levando à libertação de vapores que aderem aos resíduos de gordura deixados pela impressão digital. Quando um objeto é sujeito a este método, as impressões digitais presentes na sua superfície surgem com uma coloração branca.

Steven Bell refere ainda que a revelação das impressões digitais deixadas no local de um crime utilizando este novo método pode não ser fácil, nomeadamente quando presentes em objetos de elevadas dimensões (por exemplo, num carro).

(adaptado de <http://www.rsc.org/chemistryworld/News/2012/April/fingerprint-detection.asp>)

**Marcelo Vaz Osório** (marcelovazosorio@gmail.com)  
Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto



# XXIV IUPAC

## PHOTOCHEMISTRY CONFERENCE

15 - 20 JULY 2012 | COIMBRA

Dear Colleagues and Friends,

On behalf of the IUPAC Symposium Scientific Organizing Committee (SOC). I am very pleased to be able to invite you to attend the XXIV<sup>th</sup> IUPAC Symposium on Photochemistry, which will be held in Coimbra, from 15-20 July 2012.

**Hugh D. Burrows** (Portugal)  
Chairman International Scientific Committee

### SYMPOSIUM KEY DATES

Registration Online Opens	1 December 2011
<b>Early Bird Registration Deadline</b>	<b>6 May 2012</b>

Abstract Submission Online Opens	1 December 2011
<b>Abstract Submission Deadline</b>	<b>16 April 2012</b>
<b>Abstract Acceptance Notification</b>	<b>30 April 2012</b>
Registration Online Closes	10 July 2012
Symposium Opening	15 July 2012

### PROGRAMME TOPICS

- Organic and inorganic photochemistry from a synthetic and mechanistic point of view
- Solar energy conversion
- Photocatalysis, environmental and green photochemistry
- Materials science and engineering
- Supramolecular chemistry
- Photoactive nanoparticles and nanomaterials
- Photobiology, biophysics and skin photochemistry
- Photochemistry in medicine
- Luminescent probes, sensors and imaging
- Spectroscopy and instrumentation
- Photochromism and photoswitching
- Industrial applications of photochemistry and photophysics
- Photochemistry and cultural heritage



For General Information/ Symposium Secretariat: [photoiupac2012secretariat@leading.pt](mailto:photoiupac2012secretariat@leading.pt)

[www.photoiupac2012.com](http://www.photoiupac2012.com)

# AVANÇOS NA SÍNTESE QUÍMICA: SÍNTESE ASSISTIDA POR MICRO-ONDAS

ANA M. G. SILVA<sup>1,\*</sup>, VERA L. M. SILVA<sup>2,\*</sup>, CARLA QUEIRÓS<sup>1</sup>, JOANA PINTO<sup>2</sup>

O uso da radiação de micro-ondas como fonte de energia para a realização de transformações químicas tem sido extensivamente investigado durante os últimos anos, mas também tem levantado alguma controvérsia. Assim, este artigo tem por objetivo mostrar a crescente importância do aquecimento usando radiação micro-ondas em síntese química, dando especial ênfase a trabalhos desenvolvidos em Portugal, bem como às vantagens e limitações inerentes a esta técnica. Como existem vários instrumentos de micro-ondas para uso à escala laboratorial disponíveis comercialmente e com diferentes características, este artigo irá focar-se nos diferentes instrumentos existentes e em alguns resultados obtidos em cada um deles. Reações em paralelo assistidas por radiação micro-ondas, bem como o seu escalamento serão também abordadas e ilustradas através de exemplos.

## INTRODUÇÃO

A irradiação por micro-ondas como método de aquecimento foi originalmente observada em 1946 por Spencer quando realizava experiências no seu laboratório com vista à obtenção de um novo tubo de vácuo chamado magnetron [1]. Numa dessas experiências, ele descobriu acidentalmente que uma barra de chocolate que tinha no bolso derreteu após exposição à radiação micro-ondas. Spencer desenvolveu a ideia e rapidamente concluiu que a radiação micro-ondas poderia ser usada como método de aquecimento. Logo no ano seguinte, em 1947, Spencer projetava o primeiro forno de micro-ondas para uso doméstico [1]. Desde então, o desenvolvimento da radiação micro-ondas como fonte de aquecimento tem sido muito gradual, tal como mostra a Figura 1.

Só quatro décadas mais tarde é que se realizaram os primeiros ensaios de síntese química assistida por radiação micro-ondas. Foi em 1986 que Gedye e Giguere descreveram as primeiras reações de síntese orgânica em vasos abertos envolvendo radiação micro-ondas, utilizando para isso fornos de micro-ondas domésticos, sem qualquer controlo de temperatura ou

pressão [2, 3]. Apesar de muitas explosões violentas resultantes do rápido e descontrolado aquecimento de solventes orgânicos, os químicos de síntese cedo perceberam que esta nova tecnologia viria a trazer grandes vantagens em relação às técnicas convencionais de aquecimento. Em alguns casos, o aquecimento usando radiação micro-ondas permitiu realizar reações muito mais rapidamente do que em condições de aquecimento convencionais.

Na década de 90 começaram a surgir os primeiros fornos micro-ondas para uso em laboratório. Em 1990, Milestone S. R. L. desenvolveu o vaso HPV 80 que permitiu a digestão completa a alta pressão de materiais como óxidos, óleos e compostos farmacêuticos considerados de difícil digestão. Entre 1992 e 1996, a CEM Corporation introduziu um novo sistema, o MDS 2000, que possibilitou aumentar o número de ensaios executados em simultâneo na digestão com radiação micro-ondas. Durante o mesmo

período, a CEM Corporation introduziu também um sistema de cavidade monomodo ou mono simples (Star 2), que veio permitir um melhor controlo das condições de digestão [4].

Desde então, esta tem sido uma das áreas mais desenvolvidas da química orgânica, o que é evidenciado pelo crescente número de artigos publicados sobre este tópico [5, 6]. Uma pesquisa bibliográfica utilizando as palavras-chave “microwave” e “organic synthesis” deu origem a mais de 900 artigos científicos publicados em jornais nos últimos cinco anos (2005-2010), mais do que o dobro do número de artigos publicados nos cinco anos anteriores (2000-2005) [7]. Para além da química orgânica, a síntese assistida por radiação micro-ondas tem sido utilizada com grande sucesso noutras áreas da química, das quais se destacam a química inorgânica, química dos polímeros e materiais, nanotecnologias e processos bioquímicos. Na grande maioria dos casos, o aquecimento usando radiação micro-ondas

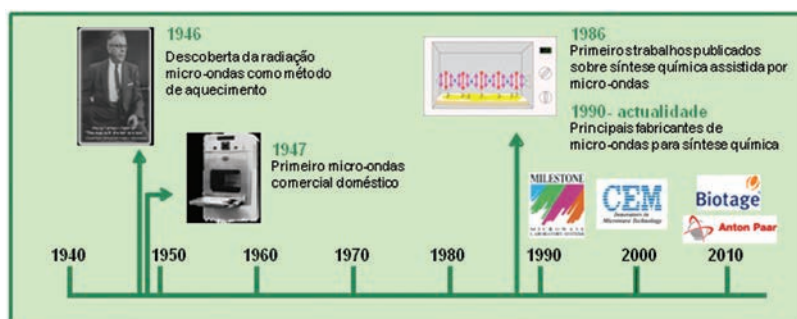


Figura 1 – Evolução do aquecimento por micro-ondas

<sup>1</sup> REQUIMTE, Departamento de Química, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto, 4169-007 Porto.

<sup>2</sup> Departamento de Química & QOPNA, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro.

\* E-mail: ana.silva@fc.up.pt; verasilva@ua.pt



permite reduzir drasticamente os tempos e aumentar o rendimento das reações.

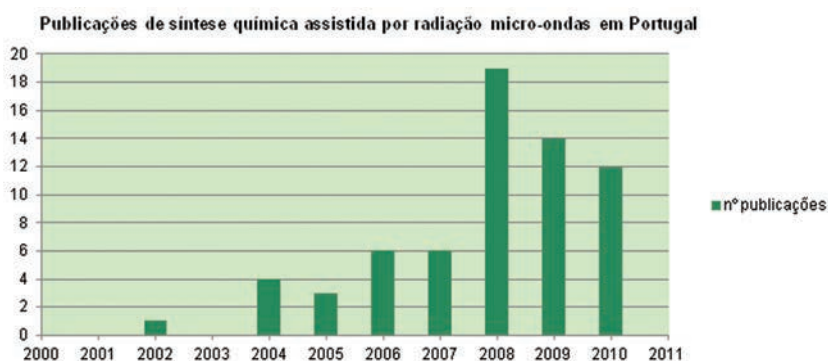
Curiosamente, em Portugal, nos últimos 10 anos (2000-2010) registaram-se 65 artigos em diferentes áreas da química, destacando-se a química orgânica, a química inorgânica, a síntese de materiais híbridos orgânicos-inorgânicos (Metal-Organic Frameworks, MOFs) e nanomateriais. Tal como mostra o Gráfico 1, os trabalhos de síntese só tiveram início em 2002 e em 2008 ocorreu o maior número de publicações de trabalhos nas áreas mencionadas anteriormente.

### PRINCÍPIOS DO AQUECIMENTO USANDO RADIAÇÃO MICRO-ONDAS

Tradicionalmente, as reações químicas são aquecidas com recurso a uma fonte de calor externa, manta de aquecimento ou banho de óleo. Esta forma de aquecimento é um método bastante lento e ineficiente de transferência de energia para uma mistura reacional, pois apresenta uma elevada inércia térmica, uma vez que depende de processos de convecção e condução do calor e da condutividade térmica dos diferentes materiais através dos quais o calor tem de penetrar, o que resulta muitas vezes numa temperatura do vaso de reação superior à da mistura reacional.

Por sua vez, o aquecimento usando radiação micro-ondas proporciona um aquecimento mais eficiente, já que este é gerado internamente por absorção direta da radiação micro-ondas por moléculas polares presentes na mistura reacional (por exemplo solventes, reagentes e catalisadores). Na Tabela 1 apresentam-se as características principais do aquecimento convencional *versus* aquecimento com radiação micro-ondas.

A radiação micro-ondas (2,45 GHz é a frequência utilizada nos fornos domésticos e de síntese química) é convertida em aquecimento segundo dois mecanismos principais: polarização dipolar e condução iónica. Os iões ou dipolos presentes numa dada reação, quando sujeitos à radiação micro-ondas, vão alinhar-se segundo o campo



**Gráfico 1** – Número de publicações de síntese química assistida por micro-ondas em Portugal na última década (2000-2010)

**Tabela 1** – Aquecimento convencional *versus* aquecimento com radiação micro-ondas

Aquecimento convencional	Aquecimento com radiação micro-ondas
A energia é transferida através das paredes do vaso reacional e, em seguida, dissipada para a mistura reacional	A radiação micro-ondas é absorvida diretamente pelas moléculas presentes na mistura reacional, sendo as paredes do vaso reacional transparentes à radiação

elétrico aplicado. Como o campo aplicado oscila, os iões ou dipolos vão realinhar-se com a corrente elétrica alternada e, durante esse processo, a energia é perdida na forma de calor através de fricção molecular e perdas dielétricas. A quantidade de calor gerado por este processo está diretamente relacionada com a capacidade dos materiais para se alinharem à frequência do campo aplicado. Se o ião ou dipolo não tem tempo para realinhar ou reorienta muito rapidamente com o campo aplicado, então não há aquecimento. Deste modo, quando se planifica uma experiência com radiação micro-ondas deve ter-se em conta as propriedades dielétricas do material a aquecer.

A capacidade de uma dada substância converter energia eletromagnética em calor é determinada por  $\tan \delta$ , grandeza que está relacionada com a constante dielétrica ( $\epsilon$ ) do material. Uma substância com elevada cons-

tante dielétrica irá absorver radiação com elevada eficiência e, consequentemente, aquecer mais rapidamente. Geralmente, os solventes mais polares como álcoois, ácidos e DMSO, têm valores elevados de constante dielétrica, pelo que são considerados bons solventes para usar com radiação micro-ondas, enquanto os solventes apolares, como hexano e tolueno, possuem constantes dielétricas muito baixas e, por isso, são considerados transparentes à radiação (Tabela 2).

Os reagentes e catalisadores da reação também contribuem para as propriedades dielétricas globais da mistura reacional. Por exemplo, os líquidos iónicos podem ser adicionados a uma mistura reacional só com o intuito de aumentar a sua capacidade de absorção da radiação [8, 9]. Aditivos como o carboneto de silício (SiC) podem ser também adicionados a solventes apolares de modo a melhorar a absorção de energia pela mistura reacional e,

consequentemente, aumentar a sua velocidade de aquecimento. Os elementos de SiC são térmica e quimicamente resistentes a temperaturas até 1500°C e compatíveis com qualquer solvente ou reagente [10].

## INSTRUMENTAÇÃO

Embora operacionalmente simples e relativamente baratos, os aparelhos de micro-ondas domésticos utilizados nas primeiras experiências de síntese orgânica sofreram com as vicissitudes próprias deste tipo de equipamento (distribuição de carga irregular, pontos quentes, etc.), e com as limitações técnicas (falta de controlo de temperatura, perda descontrolada de componentes voláteis, etc.), estando estas estritamente relacionadas com a falta de segurança dos equipamentos. Todas estas limitações, associadas à falta de reprodutibilidade dos protocolos realizados, levaram os fabricantes de aparelhos de micro-ondas a procurarem construir instrumentos mais adequados à síntese química, que incluem dispositivos de controlo de temperatura (sensores de infravermelho, termopares e fibra-ótica) e de pressão nos vasos reacionais, e dispositivos de segurança adequados à realização de transformações químicas. Assim, surgiram os equipamentos específicos para síntese assistida por radiação micro-ondas. Atualmente, existem no mercado quatro fabricantes principais que desenvolvem e comercializam os instrumentos de micro-ondas para síntese química: Biotage, CEM, Milestone e Anton Paar.

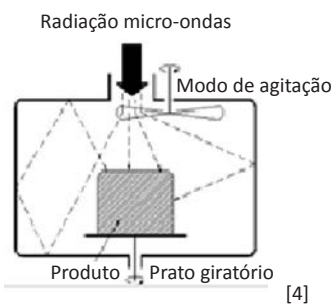
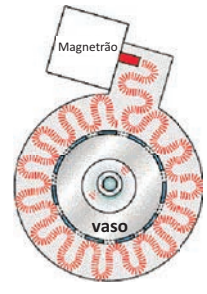
Relativamente ao desenho do reator, este pode ser do tipo multimodo ou monomodo. Nos reatores do tipo multimodo, a radiação micro-ondas é refletida nas paredes da cavidade larga do forno e um suporte rotativo permite que a distribuição do campo seja o mais homogênea possível. Em contraste, nos reatores monomodo ou modo simples, a radiação eletromagnética é focada diretamente no reator montado a uma distância fixa da fonte de radiação (Tabela 3).

A diferença fundamental entre estes dois tipos de sistemas de reatores reside no facto de que em cavidades multimodo se podem irradiar vários

**Tabela 2** – Valores de  $\tan \delta$  de alguns solventes usados em síntese

solvente	$\tan \delta$	solvente	$\tan \delta$
etilenoglicol	1,350	DMF	0,161
etanol	0,941	1,2-dicloroetano	0,127
DMSO	0,825	água	0,123
2-propanol	0,799	clorobenzeno	0,101
ácido fórmico	0,722	clorofórmio	0,091
metanol	0,659	acetoneitrilo	0,062
nitrobenzeno	0,589	acetato de etilo	0,059
1-butanol	0,571	acetona	0,054
2-butanol	0,447	tetra-hidrofurano	0,047
1,2-diclorobenzeno	0,280	diclorometano	0,042
1-metil-2-pirrolidiona	0,275	tolueno	0,040
ácido acético	0,174	hexano	0,020

**Tabela 3** – Cavidade monomodo *versus* cavidade multimodo

Cavidade multimodo	Cavidade monomodo
 <p>[4]</p>	 <p>[11]</p>
A radiação micro-ondas é refletida nas paredes da cavidade do forno	A radiação micro-ondas é direcionada ao vaso reacional
Energia dispersa na cavidade	Aquecimento mais homogêneo
Podem ser irradiados vários vasos simultaneamente	Só pode ser irradiado um vaso de cada vez

vasos reacionais simultaneamente em suporte rotativo (síntese paralela), enquanto que nos sistemas monomodo só se pode irradiar um vaso de cada vez. Além disso, a potência disponível em sistemas multimodo (em geral de 1000 a 1400 W) é superior à potência disponível em sistemas monomodo (em geral de 300 a 850 W).

Para além das características técnicas específicas de cada marca e de

cada tipo de reator, há ainda outras questões importantes que têm que ser abordadas aquando da realização duma síntese usando radiação micro-ondas. Por exemplo, as reações na ausência de solvente foram já muito populares no meio científico, no entanto, dificuldades técnicas relacionadas com o aquecimento não uniforme, com a mistura dos componentes da reação e com a monitorização da temperatura permanecem

sem resposta, o que conduziu, de certo modo, ao seu abandono. Desse modo, privilegia-se a síntese assistida por radiação micro-ondas em solução, podendo esta ser realizada em vaso aberto ou vaso fechado. Quando se trabalha em solução e em condições de vaso aberto, os solventes são aquecidos por absorção da radiação micro-ondas à pressão atmosférica. Nestas condições, o ponto de ebulição do solvente limita a temperatura de reação. Assim, com intuito de se alcançarem rendimentos mais elevados, são frequentemente utilizados em vaso aberto solventes com boa absorção de radiação micro-ondas e alto ponto de ebulição. No entanto, o uso desses solventes (por exemplo, DMF, 1-metil-2-pirrolidina e etilenoglicol) apresenta sérios desafios durante o tratamento e purificação do produto da reação. Em resposta a estas limitações surgiram então reatores de micro-ondas modernos, com monitorização *online* da temperatura e pressão, para a realização de reações em vaso fechado. Nestas condições, podem ser rapidamente atingidas temperaturas acima do ponto de ebulição do solvente. É a combinação do aquecimento rápido usando radiação micro-ondas com a tecnologia de vaso fechado que tem sido responsável pelos bons resultados observados na síntese química.

Kappe e o seu grupo de investigação da Universidade de Graz procuram dar resposta a uma das questões mais controversas em torno do aquecimento com radiação micro-ondas: *Existe ou não efeito não térmico no aquecimento com radiação micro-ondas?* Estes investigadores utilizam vasos de reação de SiC para separar os efeitos térmicos da radiação, da própria radiação. O SiC é ideal para este fim já que absorve na totalidade a radiação micro-ondas, o que faz com que o vaso reacional aqueça durante esse processo e transfira o calor para o meio reacional. Segundo Kappe, esta característica dos vasos de SiC permite utilizar solventes não polares de pouca absorção, como é o caso do tolueno ou hexano, que normalmente não se conseguiam aquecer em aparelhos de micro-ondas, mas permite também o uso de bases muito corrosivas, como hidróxidos e reagentes

como o HF, que normalmente atacam o vidro. Permite ainda a realização de transformações que envolvam o uso de metais, como por exemplo reações de Grignard [12]. A comparação de experiências envolvendo o uso de vasos de SiC com os vasos tradicionais de borossilicato sugerem que existem apenas efeitos térmicos, não havendo efeitos não térmicos resultantes do campo eletromagnético da radiação micro-ondas [12].

De facto, esta tecnologia avançada de aquecimento está em constante evolução. Recentemente, as técnicas de fluxo contínuo têm vindo a ganhar uma importância crescente, principalmente no que diz respeito ao escalamento para maiores quantidades (instalação piloto ou industrial). Nesta técnica, a mistura reacional é passada através de uma célula de fluxo transparente posicionada dentro de um reator de micro-ondas apropriado. Em fluxo contínuo é necessário ter em conta o tempo de reação otimizador para a reação em *batch*, e relacioná-lo com o tempo de permanência no reator (o tempo que a mistura reacional permanece na célula de aquecimento por radiação micro-ondas) a uma razão volume/caudal específicos. Os recentes avanços em processamento de fluxo contínuo permitem já realizar, entre outras transformações, a síntese da aspirina num só passo em mistura homogénea em reatores comerciais adaptados para trabalhar em fluxo contínuo [13-15].

Paralelamente têm surgido novos reatores em *batch* para trabalhar à escala do quilograma [16-18]. Recentemente, uma série de reações de síntese de compostos com elevada importância farmacêutica foram realizadas à escala do quilograma utilizando o reator comercial Synthos 3000 em *batch* [18]. Este reator permite trabalhar com volumes relativamente grandes de mistura reacional (máximo de 16 vasos com capacidade de 70 mL cada) utilizando temperaturas e pressões altas (240°C/ 40 bar). Os resultados mostram reduções significativas nos tempos das reações e bons rendimentos. No entanto, este equipamento apresenta ainda algumas limitações relacionadas com a agitação magnética pouco eficiente, o

tempo de arrefecimento muito longo e o facto de não ser possível realizar vários *batches* sequencialmente de forma automática.

Existem ainda aparelhos de micro-ondas hifenados que incluem, por exemplo, a combinação da radiação micro-ondas com ultrassons, bem como com radiação ultravioleta [19].

Assim podemos concluir que, no que respeita ao escalamento das reações assistidas por radiação micro-ondas, ainda não existe nenhuma tecnologia disponível comercialmente que possa ser utilizada em todas e quaisquer circunstâncias, sem apresentar um conjunto de limitações.

#### VANTAGENS DA SÍNTESE ASSISTIDA POR RADIAÇÃO MICRO-ONDAS

As vantagens desta tecnologia têm sido demonstradas em várias áreas da química, desde o desenvolvimento de metodologias sintéticas até à aplicação em processos industriais [20].

As principais vantagens associadas ao aquecimento com radiação micro-ondas são:

- Obtenção de temperaturas de reação elevadas através da combinação da radiação micro-ondas com a utilização de vasos fechados.
- Redução dos tempos de reação, rendimentos elevados e reações mais “limpas”, facilitando os processos de purificação.
- Utilização de solventes de baixo ponto de ebulição em vasos fechados sob pressão e a temperaturas elevadas (acima do ponto de ebulição do solvente).
- Combinação da radiação micro-ondas com catalisadores que absorvem fortemente a radiação.
- Monitorização *online* da temperatura e pressão estabelecendo condições experimentais mais facilmente reproduzíveis.
- Adaptação a síntese sequencial automatizada ou síntese paralela.
- Possibilidade de combinação com outras técnicas, como por exemplo sonoquímica e fotoquímica.



## DESvantagens DA Síntese Assistida POR Radiação Micro-Ondas

A utilização laboratorial em síntese orgânica de aparelhos de micro-ondas em substituição dos métodos de aquecimento convencionais (banhos de óleo e mantas de aquecimento) tem-se generalizado e, além disso, tem sido apresentada como sendo um processo energeticamente eficiente. Mas será o aquecimento usando radiação micro-ondas um processo de aquecimento energeticamente eficiente? A resposta a esta questão é difícil por dois motivos, só existem relatos sobre este assunto a partir de 2005 e são poucos. Por outro lado, o cálculo do consumo de energia para uma reação aquecida usando radiação micro-ondas é complexo [21-23]. As principais desvantagens e limitações associadas a esta tecnologia são:

- A baixa eficiência do magnetrão, dado que apenas 50% da energia elétrica usada é transformada em energia micro-ondas. Alguns estudos demonstram que, no caso de refluxo em vaso aberto, o aquecimento com radiação micro-ondas consome significativamente mais energia do que as técnicas de aquecimento convencionais [24, 25].
- Nem toda a radiação gerada é absorvida pela mistura reacional. Alguns estudos demonstram que os consumos de energia no aquecimento com radiação micro-ondas dependem da natureza do solvente, mais precisamente do seu momento dipolar, que afeta as características de absorção da radiação pela mistura reacional, e do seu ponto de ebulição, bem como da escala de operações – à escala laboratorial (5-200 mmol de reagentes num volume de 4-300 ml) [5].
- O aquecimento com radiação micro-ondas pode não ser exequível, por exemplo se a reação requer um solvente apolar cuja absorção da radiação é limitada. Este problema pode ser contornado usando reagentes, catalisadores, etc., que sejam polares e proporcionem a absorção, ou então usando um agente passivo, fortemente absor-

vente (por exemplo uma vareta de SiC inserida no reator), que facilite o aquecimento [26].

- Embora a energia que é necessária para aquecer um tubo reacional selado num reator monomodo seja pequena, não se pode estabelecer uma comparação direta com o banho de óleo no qual é possível aquecer volumes maiores ou então vários tubos ao mesmo tempo. Quando comparado com mantas de aquecimento elétricas, onde a maioria da energia elétrica é convertida em calor, o aquecimento com radiação micro-ondas é pouco eficiente. Este tipo de aquecimento também se revela pouco eficiente quando são aquecidas reações à pressão atmosférica, comparativamente com os resultados obtidos para reações em vaso aberto aquecidas de forma convencional.
- O escalamento para a grande escala industrial é bastante problemático e difícil de realizar, devido à profundidade de penetração da radiação micro-ondas em meios absorventes ser limitada, além de que a questão da segurança também levanta problemas. Além disso, o aquecimento homogêneo em grande escala não é garantido, não se conseguindo saber o valor exato da temperatura a que se está a operar. Até ao momento, o escalamento foi realizado apenas à escala laboratorial, da ordem de algumas gramas para centenas de gramas ou, em reatores de fluxo, e mais recentemente em reatores em *batch*, para a escala intermédia de alguns quilogramas [27, 28].
- Os reatores de fluxo são naturalmente abertos, pelo que também não possibilitam o aquecimento em vaso selado. Deste modo, o escalamento de situações em que o uso de radiação micro-ondas teve mais êxito no laboratório parece problemático e o escalamento para maiores quantidades (instalação piloto ou industrial) só poderá ser realizado por replicação de reatores [29].
- Muitas aplicações industriais que são realizadas rotineiramente e em larga escala são efetuadas em reatores especialmente projetados, normalmente com guias de

onda otimizados e muitas vezes em frequências alternativas (já que isso também afeta a eficiência da transferência de energia). Contudo, a adaptação de reatores a cada caso torna-os obviamente menos versáteis, mais limitados e com custos mais elevados.

- O controlo da temperatura depende fortemente do método de medição, assim como da posição do dispositivo de medição no reator. Isso torna difícil a comparação com as condições de reação convencionais e leva a especulações sobre a existência de “efeitos não térmicos” nas reações químicas assistidas por micro-ondas [30].
- A tecnologia envolvida na conceção dos aparelhos de micro-ondas faz com que o elevado custo de investimento seja mais uma desvantagem.

Resumindo, o aquecimento com radiação micro-ondas possui várias limitações e nem sempre possibilita um aumento da eficiência relativamente aos aquecimentos convencionais, pelo que a eficiência energética deverá ser avaliada caso a caso.

## Síntese Assistida Por Radiação Micro-Ondas em Portugal

Ao contrário do que aconteceu noutros países, em que os primeiros trabalhos foram realizados em vaso aberto utilizando equipamentos de micro-ondas domésticos, em Portugal, a investigação começou já com a utilização de equipamento específico para síntese.

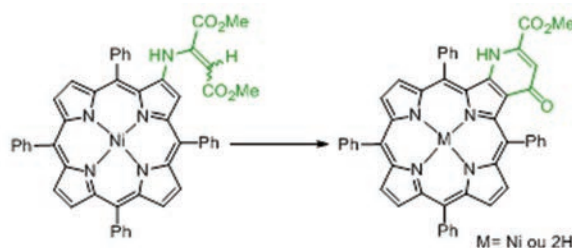
Uma das primeiras áreas a serem exploradas foi a química orgânica - refere-se como exemplo a utilização da radiação micro-ondas na síntese de 3-estirilcromonas através da condensação de 3-formilcromonas com ácidos fenilacéticos [31]. Outro exemplo que ilustra bem a importância do aquecimento com radiação micro-ondas em síntese orgânica envolve a preparação de porfirinas fundidas ao anel piridinona a partir de reações de ciclização. Foram testados três protocolos: aquecimento convencional, aquecimento com radiação micro-ondas e reagente de Eaton (mistura de  $P_2O_5$  e  $MeSO_3H$ ) [32]. Na realização das reações por aquecimento com ra-

dição micro-ondas foram utilizados dois reatores diferentes: multimodo e monomodo. Os resultados mostram que no reator multimodo, em condições de vaso aberto, a ciclização foi completa após 40 min a 180°C (temperatura de ebulição do solvente). Já com o reator monomodo, em vaso fechado, e aumentando a temperatura da reação para 220°C, a ciclização completou-se em apenas 4 min, com uma notável redução no tempo de reação (Tabela 4). Já em condições convencionais (entrada 1) e com o reagente de Eaton (entrada 4), a ciclização é muito mais lenta (6 h e 2 h, respectivamente), obtendo-se rendimentos relativamente mais baixos.

Os compostos do tipo estirilpirazóis (Figura 2) são muito relutantes a participar como dienos em reações de Diels-Alder envolvendo o anel do pirazol devido à perda de aromaticidade inerente a estas reações. Por isso as reações de cicloadição de estirilpirazóis requerem dienófilos muito reativos, assim como temperaturas e pressões elevadas (120-140°C e 8-10 atm), e geralmente são reações lentas, dando origem aos correspondentes cicloaductos em rendimentos moderados. No entanto, através da reação de estirilpirazóis com *N*-metilmaleimida em aquecimento com micro-ondas, num reator multimodo, sem solvente, à pressão atmosférica e a uma potência de 800 W, foi possível obter os cicloaductos com bons rendimentos [33].

Um outro exemplo, bastante ilustrativo, refere-se à síntese de 4-isoxazolininas (Figura 2) via reações de cicloadição 1,3-dipolares de nitronas geradas a partir de alenoatos, seguidas de rearranjo térmico para dar origem a pirróis. Neste caso verificou-se que a principal vantagem da aplicação da radiação micro-ondas está relacionada com a diminuição do tempo da reação [34]. Ainda no contexto da utilização da radiação micro-ondas em reações de cicloadição 1,3-dipolares, foi recentemente publicado um artigo de revisão que destaca os desenvolvimentos mais recentes nesta área, com especial ênfase para aspetos relacionados com a régio- e estereosseletividade e eficiência das reações [35].

Tabela 4 – Protocolos de Ciclização



Entrada	Método	Temp (°C)	Tempo	Rendimento (%)
1	Banho de óleo	200	6 h	74
2*	Micro-ondas vaso aberto	180	40 min	93
3**	Micro-ondas vaso fechado	220	4 min	88
4	Reagente de Eaton	50	2 h	84

\* Reator multimodo

\*\* Reator monomodo

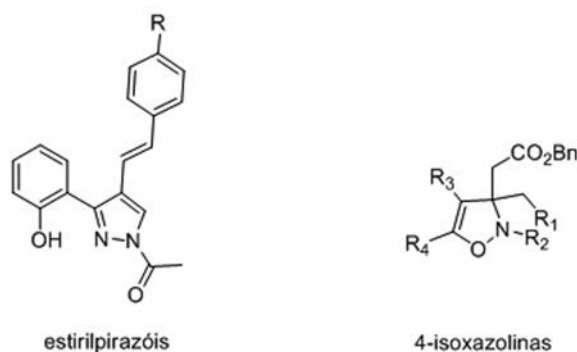


Figura 2 – Estruturas de estirilpirazóis e 4-isoxazolininas

A catálise assistida por radiação micro-ondas também tem sido explorada com sucesso. Exemplo disso é o trabalho desenvolvido por Pombeiro e colaboradores que utilizam complexos de alcoxi-triazapentadienato cobre(II) como catalisadores muito eficientes em reações de oxidação assistida por radiação micro-ondas de álcoois secundários em cetonas, na presença de *t*-butil-hidroperóxido e na ausência de solvente (ver Tabela 5) [36]. Nestas condições (30 minutos, 80°C, usando a radiação micro-ondas), o 1-feniletanol é oxidado a acetofenona com rendimento quantitativo enquanto, nas mesmas condições, mas utilizando aquecimento convencional, o produto é apenas obtido com rendimento de 4%.

A epoxidação de olefinas, tais como *cis*-cicloocteno e *R*-(+)-limoneno, utilizando complexos de molibdénio

como catalisadores na presença de *t*-butil-hidroperóxido, foi também explorada com recurso ao aquecimento convencional e à catálise assistida por micro-ondas [37, 38]. Os resultados demonstraram que estes dois métodos de aquecimento não afetam a seletividade das reações, mas afetam significativamente a sua velocidade (geralmente em micro-ondas é necessário menos tempo para atingir a mesma percentagem de conversão). Mais recentemente, o aquecimento com radiação micro-ondas tem despertado a atenção de outras áreas, nomeadamente de ciências dos materiais. O interesse na avaliação de parâmetros como a qualidade dos cristais, a sua morfologia e tamanho tem levado muitos investigadores a reproduzirem sínteses de MOFs já conhecidas com radiação micro-ondas ou a desenvolverem novos materiais usando radiação micro-ondas para

diferentes aplicações. Rocha e colaboradores, durante a realização de experiências com vista à obtenção de sistemas lantanídeo/ ácido 2,5-piridinodicarboxílico usando o aquecimento com radiação micro-ondas, observaram inesperadamente a síntese de uma nova estrutura de MOF com canais largos unidimensionais. Este material foi isolado em condições suaves em apenas 30 minutos de reação [39]. Os desenvolvimentos mais significativos da síntese de MOFs assistida por radiação micro-ondas foram muito recentemente revistos pelos mesmos autores, enfatizando as principais vantagens deste método de aquecimento no isolamento de grandes quantidades desses materiais em períodos de tempo mais curtos [40].

### SÍNTESE ASSISTIDA POR RADIAÇÃO MICRO-ONDAS: QUE FUTURO?

O aquecimento por micro-ondas é uma técnica ainda muito recente, com uma margem de aperfeiçoamento maior do que outras técnicas. Apesar da intensa investigação desenvolvida ao longo destes anos, existem ainda muitas limitações que não foram ultrapassadas. Uma das maiores limitações está relacionada com o alto custo da energia de micro-ondas por quilowatt instalado e a relativa ineficiência do magnetrão na conversão de energia elétrica em energia micro-ondas. Atualmente, os fabricantes de aparelhos de micro-ondas continuam a desenvolver esforços com vista à construção de magnetrons mais eficientes e aperfeiçoamento dos de-

senhos dos reatores já existentes, principalmente no que diz respeito a questões de segurança. Deste modo, espera-se o aparecimento de novos reatores de micro-ondas, energeticamente mais eficientes, capazes de trabalhar em condições de elevada pressão e temperatura e em larga escala.

### AGRADECIMENTOS

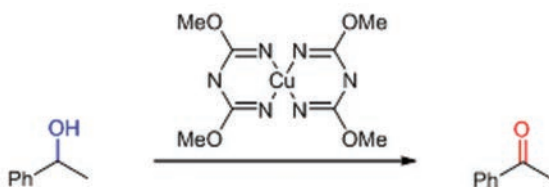
Os autores agradecem ao projeto PTDC/QUI-QUI/102454/2008, financiado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT).

### REFERÊNCIAS

- [1] J.M. Osepchuk, IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest **5165967** (2009) 1397.
- [2] R. Gedye, F. Smith, K. Westaway, H. Ali, L. Baldisera, L. Laberge, J. Roussell, *Tetrahedron Lett.* **27** (1986) 279.
- [3] R.J. Giguere, T.L. Bray, S.M. Duncan, G. Majetich, *Tetrahedron Lett.* **27** (1986) 4945.
- [4] M. Taylor, *Developments in Microwave Chemistry*, Evaluéserv, RSC, 2005.
- [5] C.O. Kappe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** (2004) 6250.
- [6] C.O. Kappe, D. Dallinger, *Mol. Divers.* **13** (2009) 71.
- [7] Scopus data.
- [8] N.E. Leadbeater, H.M. Torenus *J. Org. Chem.* **67** (2002) 3145.
- [9] E. Van der Eycken, P. Appukkuttan, W. De Borggraave, W. Dehaen, D. Dallinger, C.O. Kappe *J. Org. Chem.* **67** (2002) 7904.

- [10] J.M. Kreamsner, C.O. Kappe, *J. Org. Chem.* **71** (2006) 4651.
- [11] Self-turning Patented Focused™ single-mode cavity system by CEM Corporation.
- [12] D. Obermayer, B. Gutmann, C.O. Kappe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009) 8321.
- [13] M.H.C.L. Dressen, B.H.P. van de Kruijs, J. Meuldijk, J.A.J.M. Veke-mans, L.A. Hulshof, *Org. Process Res.Dev.* **14** (2010) 351.
- [14] M.D. Bowman, J.L. Holcomb, C.M. Kormos, N.E. Leadbeater, V.A. Williams, *Org. Process Res. Dev.* **12** (2008) 41.
- [15] F. Bergamelli, M. Iannelli, J.A. Marafie, J.D. Moseley, *Org. Process Res. Dev.* **14** (2010) 926.
- [16] C.R. Strauss, *Org. Process Res. Dev.* **13** (2009) 915.
- [17] J.R. Schmink, C.M. Kormos, W.G. Devine, N.E. Leadbeater, *Org. Process Res. Dev.* **14** (2010) 205.
- [18] H. Lehmann, L. LaVecchia, *Org. Process Res. Dev.* **14** (2010) 650.
- [19] C. Leonelli, T.J. Mason, *Chem. Eng. Process* **49** (2010) 885.
- [20] C.R. Strauss, R.S. Varma, *Top. Curr. Chem.* **266** (2006) 199.
- [21] M.J. Gronnow, R.J. White, J.H. Clark, D.J. Macquarrie, *Org. Process Res. Dev.* **9** (2005) 516.
- [22] J.D. Moseley, C.O. Kappe, *Green Chem.* **13** (2011) 794.
- [23] M. Nüchter, B. Ondruschka, W. Bonrath, A. Gumb, *Green Chem.* **6** (2004) 128.
- [24] J.D. Moseley, E.K. Woodman, *Energy Fuels* **23** (2009) 5438.
- [25] T. Razaq, C.O. Kappe, *ChemSusChem* **1** (2008) 123.
- [26] C.O. Kappe, *Chem. Soc. Rev.* **37** (2008) 1127.
- [27] J.M. Kreamsner, A. Stadler, C.O. Kappe, *Top. Curr. Chem.* **266** (2006) 233.
- [28] H. Lehmann, L. LaVecchia, *Org. Process Res. Dev.* **14** (2010) 650.
- [29] T.N. Glasnov, C.O. Kappe, *Macromol. Rapid Commun.* **28** (2007) 395.
- [30] J. Robinson, S. Kingman, D. Irvine, P. Licence, A. Smith, G. Dimitrakis, D. Obermayer, C.O. Kappe *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12** (2010) 4750.
- [31] V.L.M. Silva, A.M.S. Silva, D.C.G.A. Pinto, J.A.S. Cavaleiro, T. Patonay, *Synlett* **15** (2004), 2717.
- [32] A.M.G. Silva, B. Castro, M. Rangel, A.M.S. Silva, P. Brandão, V. Felix, J.A.S. Cavaleiro, *Synlett* **6** (2009) 1009.
- [33] V.L.M. Silva, A.M.S. Silva, D.C.G.A.

Tabela 5 – Exemplo de catálise assistida por micro-ondas [36]



Método	Temp (°C)	Tempo	Rendimento (%) <sup>a</sup>
Aquecimento convencional	80	30 min	4
Aquecimento usando radiação micro-ondas	80	30 min	100

<sup>a</sup> Valores obtidos no GC



- Pinto, J. Elguero, J.A.S. Cavaleiro  
*Eur. J. Org. Chem.* (2009) 4468.
- [34] S.M.M.Lopes, C.M.Nunes, T.M.V.D. Pinho e Melo, *Tetrahedron* **66** (2010) 6078.
- [35] M. Pineiro, T.M.V.D. Pinho e Melo, *Eur. J. Org. Chem.* (2009), 5287.
- [36] P.J. Figiel, M.N. Kopylovich, J. Lasri, M.F.C. Guedes da Silva, J.J.R. Fraústo da Silva, A.J.L. Pombeiro, *Chem. Commun.* **46** (2010) 2766.
- [37] M. Abrantes, P. Neves, M.M. Antunes, S. Gago, F.A.A. Paz, A.E. Rodrigues, M. Pillinger, I.S. Gonçalves, C.M. Silva, A.A. Valente, *J. Mol. Catalysis A: Chemical* **320** (2010) 19.
- [38] T.R. Amarante, P. Neves, A.C. Coelho, S. Gago, A.A. Valente, F.A.A. Paz, M. Pillinger, I.S. Gonçalves, *Organometallics* **29** (2010) 883.
- [39] P. Silva, A.A. Valente, J. Rocha, F.A.A. Paz, *Cryst. Growth Des.* **10** (2010) 2025.
- [40] J. Klinowski, F.A.A. Paz, P. Silva, J. Rocha, *Dalton Trans.* **40** (2011) 321.

## ATUALIDADE CIENTÍFICA

NANOPARTÍCULAS HÍBRIDAS DE COBRE-OURO PARA CONVERSÃO DE CO<sub>2</sub>

O cobre é um dos poucos metais capazes de converter o dióxido de carbono em hidrocarbonetos com exigências energéticas relativamente baixas. Quando aplicado a um eletrodo e estimulado com a respetiva carga elétrica, o cobre atua como um catalisador, promovendo uma reação eletroquímica que reduz o CO<sub>2</sub> a metano ou metanol. Deste modo, numerosos investigadores têm estudado o potencial do cobre como um meio energeticamente eficiente para reciclar as emissões de CO<sub>2</sub> em centrais térmicas, permitindo a sua recuperação e posterior conversão em metano, que por sua vez poderia ser utilizado como fonte energética da própria central.

Este sistema possibilitaria uma redução significativa das emissões de gases com efeito de estufa em centrais térmicas de carvão e gás natural. No entanto, o cobre é um metal instável (que oxida facilmente), o que pode afetar negativamente as suas propriedades como catalisador, provocando um retardamento da reação e a produção de produtos secundários indesejados, como monóxido de carbono ou ácido fórmico.

Agora, investigadores do Massachusetts Institute of Technology (MIT) propõem uma nova solução, que pode reduzir as necessidades energéticas na conversão de CO<sub>2</sub> mediada por cobre, para além de possibilitar uma muito melhor estabilização do metal. O grupo concebeu nanopartículas de cobre combinado com ouro, que se revelam resistentes à oxidação. Deste modo, os investigadores verificaram que bastava adicionar uma pequena quantidade de ouro para tornar o cobre muito mais estável. Posteriormente demonstraram experimentalmente que eletrodos revestidos com as nanopartículas híbridas necessitavam de consideravelmente menos energia para converter CO<sub>2</sub> do que os eletrodos revestidos com nanopartículas de cobre puro.

Um artigo detalhando os resultados será publicado no *Chemical Communications*. Assim, a coautora Kimberly Hamad-Schifferli, Professora Associada de Engenharia Mecânica e Engenharia Biológica no MIT, afirma “normalmente introduz-se bastante energia para se converter o dióxido de carbono em algo útil e agora demonstrámos que as nanopartículas de cobre-ouro são muito mais estáveis e revelam potencial para baixar as necessidades energéticas da reação”.

A escolha de sintetizar o material à nanoescala deveu-se ao facto de “as partículas mais pequenas possibilitarem maiores áreas superficiais disponíveis para a interação com as moléculas de CO<sub>2</sub>”.

Hamad-Schifferli trabalhou com Yang Shao-Horn, o Professor Associado Gail E. Kendall, de Engenharia Mecânica no MIT, o pós-doc Zhichuan Xu e Erica Lai. A equipa escolheu o ouro como um metal apropriado para combinar com o cobre, devido ao conhecimento prévio das suas propriedades, já que anteriormente se tinha verificado que esta combinação prevenia a oxidação do cobre. A síntese das nanopartículas foi realizada pela adição de sais contendo ouro a uma solução de sais de cobre. Esta solução foi aquecida para a produção de nanopartículas híbridas de cobre e ouro.

Posteriormente, Xu submeteu estas nanopartículas a uma sequência de operações, de forma a obter um pó que foi usado para revestir um pequeno eletrodo. Para testar a reatividade das nanopartículas, Xu introduziu o eletrodo na solução, onde borbulhou CO<sub>2</sub>. Depois aplicou uma reduzida diferença de potencial no eletrodo, e mediu a corrente resultante na solução. Supôs-se que esta corrente deveria ser um indicador fiável da eficiência da reação promovida pelas nanopartículas.

Deste modo, a equipa descobriu que o potencial aplicado para a obtenção de uma corrente estável era muito menor para as nanopartículas de cobre-ouro do que para as correspondentes de cobre ou de ouro puro, o que é um indicador de que a quantidade de energia requerida para manter a reação é muito menor no caso das nanopartículas híbridas em relação às nanopartículas de cobre puro. Hamad-Schifferli acrescenta que pretende observar com maior pormenor a estrutura das nanopartículas de cobre-ouro de modo a otimizar a sua configuração para a conversão de CO<sub>2</sub>.

No entanto, a investigadora reconhece que o revestimento de eletrodos à escala industrial com um material à base de ouro pode revelar-se dispendioso. Todavia, é possível que as poupanças de energia e o potencial de reutilização compensem os custos iniciais.

(adaptado do artigo de 11/04/2012 de Jennifer Chu: *Hybrid Copper-Gold Nanoparticles Convert CO<sub>2</sub>*, Chemical & Engineering News - <http://web.mit.edu/newsoffice/2012/hybrid-copper-gold-nanoparticles-convert-co2.html>)

Paulo Brito (paulo@ipb.pt)  
Instituto Politécnico de Bragança

# INDICADORES BIOLÓGICOS DE EXPOSIÇÃO (IBE) A AGENTES QUÍMICOS

J. P. SOUSA<sup>1,\*</sup>, M. L. PEREIRA<sup>2</sup>

A proteção da saúde dos trabalhadores expostos a diversas substâncias químicas constitui uma preocupação constante no âmbito da saúde ocupacional. Este trabalho salienta a importância dos indicadores biológicos de exposição na monitorização contínua de indivíduos expostos a esses agentes em ambiente profissional, com destaque para os laboratórios químicos. Na União Europeia, muitos são os países que assumem como valores de referência para os valores limite de exposição (VLE) e índices biológicos de exposição (IBE) a agentes químicos os recomendados pela American Conference of Governmental Industrial Hygienist (ACGIH). Ao nível nacional, também os VLE constantes da NP 1796, datados de 2007, têm por base a ACGIH. Na legislação portuguesa (Decreto-Lei n.º 247/89), em termos de IBE, só existem valores para a exposição ao chumbo, em que é fixado em termos de ácido-aminolevulínico em urina de 20 mg/g de creatinina.

## INTRODUÇÃO

Entende-se por indicador biológico um parâmetro apropriado avaliado num meio biológico do trabalhador, medido num determinado momento e, estando associado, direta ou indiretamente, com a exposição global, isto é, por todas as vias de entrada no organismo de um determinado agente químico. Como meios biológicos utilizam-se o ar exalado, a urina, o sangue, saliva, suor e outros, de acordo com o documento produzido pelo Instituto Nacional de Seguridade e Higiene en el Trabajo (INSHT) em 2011 [1]. Neste artigo, define-se um parâmetro, no meio de medição e no momento de recolha da amostra. Esta medida pode indicar a intensidade de uma exposição recente, a exposição média diária ou a quantidade total do agente acumulado no organismo, ou seja, o teor total do agente químico ou biológico.

O desenvolvimento de métodos e técnicas analíticas como os da biologia celular e molecular tem demonstrado a importância dos meios biológicos acima referidos como instrumentos valiosos na avaliação da exposição ocupacional e ambiental da população [2].

De acordo com o documento publicado pelo INSHT, consideram-se dois

tipos de indicadores biológicos de exposição: i) IB de dose, o qual é um parâmetro que mede a concentração de um agente químico ou de algum dos seus metabolitos no meio biológico do trabalhador exposto; ii) IB de efeito, como sendo um parâmetro que pode identificar alterações bioquímicas reversíveis, induzidas de um modo característico pelo agente químico ao qual está exposto o trabalhador.

Prista e Uva (2006) referem a importância dos indicadores biológicos de exposição nos programas de prevenção da exposição profissional a agentes químicos, salientando as potencialidades e limitações no que concerne a doenças profissionais e/ou acidentes de trabalho [3].

Segundo Rosa (2004), para um agente químico com eficiência biológica, proceder-se-á à sua biomonitorização da avaliação da exposição total a produtos químicos presentes em locais de trabalho através da medida de um “determinante” apropriado em material biológico obtido de um trabalhador num tempo específico [4]. Segundo o autor, os Índices Biológicos de Exposição (IBE) são valores que representam limites de determinantes (quantidade de substâncias ou seus metabolitos ou reação fisiológica) aos quais um trabalhador pode estar exposto sem risco demonstrável para a saúde e bem estar.

A utilização dos IBE, no contexto de uma adequada implementação de

estratégias de avaliação do risco de exposição a agentes químicos, é reconhecida internacionalmente como uma medida importante no âmbito da prevenção das doenças profissionais. O documento espanhol relativo aos valores limite de exposição (VLE) [1], adota como IBE, à semelhança de outros Estados-membros da União Europeia, os valores limite de exposição e os indicadores biológicos de exposição propostos pela ACGIH, publicado em 2009 [5]. O documento do INSHT é a ferramenta mais recente no que diz respeito a valores limite de exposição, quer a agentes químicos, quer a agentes biológicos.

Segundo consta dos documentos da ACGIH e do INSHT, entende-se por Indicador Biológico de Exposição a concentração de um marcador biológico resultante da exposição a um dado agente químico, em fluido biológico identificado e que corresponde ao resultado da monitorização de trabalhadores saudáveis expostos por inalação a concentrações ao nível do valor limite de exposição – média ponderada (VLE-MP) para aquele agente.

## VALORES DOS IBE

A notação IBE é indicada quando é recomendado um índice biológico de exposição para um agente. A monitorização biológica deve ser instituída de forma a avaliar todas as fontes de exposição a determinado agente, incluindo a via cutânea, ingestão e exposição não profissionais.

<sup>1</sup> Academia Militar, CINAMIL, MDN, Rua Gomes Freire, 1150-244 Lisboa

<sup>2</sup> Departamento de Biologia, CICECO, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro

\*joaopsousa1@iol.pt

Na Tabela 1 encontram-se valores de IBE para alguns agentes químicos com predominância nos locais de trabalho e nos laboratórios de química. Apresenta-se uma comparação entre os IBE vigentes em Espanha (através do documento publicado pelo INSHT) e os estipulados pela ACGIH.

Refira-se que a nível nacional, a CERTITECNA coordena uma Comissão Técnica (CT-42), responsável pela atualização da NP-1796 com base nos valores estipulados no documento da ACGIH. A grande maioria dos Estados-membros da União Europeia também adota a política de transpor para os respetivos quadros norma-

tivos os valores estipulados por este organismo americano.

Da Tabela 1 podemos constatar que os valores são, na sua esmagadora maioria, idênticos.

A monitorização biológica constitui uma ferramenta para a avaliação da exposição dos trabalhadores e do risco que tal exposição apresenta para a saúde do Homem. Uma correta monitorização dos agentes químicos nos locais de trabalho fomenta assim uma cultura preventiva, essencialmente ao nível das doenças profissionais. O indicador biológico de exposição pode ser: i) a própria substância quí-

mica; ii) um ou mais metabolitos; iii) uma alteração bioquímica reversível característica, induzida pela substância química, de acordo com o estipulado pela ACGIH.

## RELAÇÃO ENTRE OS IBE E VLE

Os indicadores biológicos são biomarcadores de absorção individual de uma substância. A monitorização pessoal para determinar a exposição profissional indica a potencial exposição por inalação e via cutânea de um grupo de trabalhadores ou de um indivíduo. A grande maioria dos IBE é baseada numa correlação direta com o VLE [6]. Alguns dos IBE (ex. o

Tabela 1 – Valores de IBE vinculados pelo INSHT e pela ACGIH

Nome do agente	IBE / INSHT	IBE / ACGIH
Acetona	50mg/L	50mg/L
Anilina	50mg/g creatinina	50mg/L
Arsénio	35µg As/L	35µg As/L
Cádmio e compostos inorgânicos	5µg/g creatinina	5µg/g creatinina
Cádmio (no sangue)	5µg/L	5µg/L
Ciclohexanona	80mg/L	80mg/L
Cobalto (na urina)	15µg/L	15µg/L
Cobalto (no sangue)	1 µg/L	1µg/L
Crómio (total na urina)	10µg/L ; 25µg/L	25µg/L; 10µg/L
Diclorometano	0,3mg/L	0,3mg/L
N,N-Dimetilacetamida	30mg/g creatinina	30mg/g (creatinina)
N,N-Dimetilformamida	15mg/L	15mg/L
Estireno (Ácido mandaléico mais ácido fenilglicoxílico na urina)	400mg/g creatinina (0,2mg/L em sangue venoso)	400mg/g creatinina (0,2mg/L em sangue venoso)
Etilbenzeno	700mg/g creatinina	0,7g/g de creatinina
Fenol	250mg/g de creatinina	250mg/g de creatinina
Fluoretos	8mg/L	10mg/g de creatinina
2-Furaldeído (Ácido furóico na urina)	200mg/L	200mg/L
n-Hexano (2,5-Hexanodiona na urina)	0,4mg/L	0,4mg/L
Mercúrio inorgânico total na urina e no sangue	35µg/g creatinina 15µg/L	35µg/g creatinina 15µg/L
Metanol	15mg/L	15mg/L
Metil-n-butilcetona (2,5-Hexanodiaona na urina)	0,4mg/L	0,4mg/L
Metiletacetona	2mg/L	2mg/L
Metilisobutilcetona	3,5mg/L	2mg/L
Monóxido de carbono (Carboxihemoglobina no sangue)	3,5% carboxihemoglobina	3,5% hemoglobina
Monóxido de carbono na fração final de ar exalado	20 ppm	20 ppm
Nitrobenzeno (p-Nitrofenol total em urina)	5mg/g creatinina	5mg/g creatinina
Nitrobenzeno (Metahemoglobina no sangue)	1,5% de hemoglobina	1,5% de hemoglobina
Paratão (p-Nitrofenol total na urina)	0,5mg/g creatinina	0,5mg/g creatinina



chumbo) são resultado do VLE, mas relacionam-se diretamente como desenvolvimento de um efeito adverso na saúde.

Os IBE são apresentados como indicação da substância por meio da sua designação e dos respetivos números CAS (Chemical Abstract Service Registry Number). Os IBE são expressos em determinadas unidades, com base no tipo de amostra considerada. Assim, por exemplo, numa amostra de sangue, os IBE baseiam-se na percentagem de hemoglobina, enquanto que numa amostra de ar exalado, os IBE são expressos em ppm de ar exalado.

Os IBE são linhas de orientação para utilização na avaliação de riscos potenciais para a saúde na prática da higiene ocupacional e podem estar relacionados com o desenvolvimento de doenças profissionais, em caso de exposição prolongada dos trabalhadores. Os IBE não são indicadores de uma clara separação entre exposições perigosas e não perigosas. A título exemplificativo, é possível que a concentração de um indicador biológico de um dado indivíduo ultrapasse o correspondente IBE sem que isso represente um risco de saúde acrescido.

Se as medições das amostras recolhidas num trabalhador em diferentes ocasiões excedem o valor do IBE de forma continuada, então a causa da ocorrência desse valor deve ser in-

vestigada e devem ser tomadas ações para reduzir a exposição do trabalhador. Também deve ser realizada uma investigação quando a maioria das medições em amostras obtidas de um grupo de trabalhadores do mesmo turno e a desempenhar tarefas similares e no mesmo espaço, exceda os IBE.

Pode ser apropriada a retirada de um trabalhador de um local com exposição no seguimento de um resultado elevado da monitorização biológica, se houver razões que indiciem a ocorrência de uma exposição significativa. Ao contrário, resultados abaixo do valor IBE não significam necessariamente exposição ao risco associado. A nível nacional, o Decreto-Lei n.º 247/89, de 21 de Agosto, que tem por objetivo a proteção dos trabalhadores contra os riscos que possam decorrer da exposição ao chumbo (Pb) metálico e aos seus compostos iónicos nos locais de trabalho, contém o VLE e o IBE do Pb [7]. O valor de concentração do chumbo no ar dos locais de trabalho não deve ultrapassar os 150 microgramas/m<sup>3</sup>, referidos a 8 horas diárias e 40 horas semanais. O IBE é fixado em 70 microgramas por 100 ml de sangue, em que o ALAU deve ser inferior a 20 mg/g de creatinina.

### CONCLUSÕES

Os IBE são uma mais valia para prevenir a ocorrência de doenças profissionais dos trabalhadores expostos a substâncias químicas nocivas muitas

vezes existentes nos locais de trabalho. A relação existente entre os VLE e os IBE demonstra que os primeiros nunca devem ser ultrapassados nos postos de trabalho, de forma a minimizar os efeitos que causam nos trabalhadores expostos e o bem-estar da população em geral. A CT-42, que está a transpor e a atualizar os valores constantes do documento da ACGIH, compromete-se a atualizar bianualmente os valores produzidos nos Estados Unidos da América para o quadro normativo interno, a ser publicado como uma NP, pelo Instituto Português para a Qualidade (IPQ).

### REFERÊNCIAS

- [1] Limites de Exposición Profesional para Agentes Químicos em España, INSHT, 2011.
- [2] J.P. Sousa, Doenças causadas por Agentes Biológicos, *Proelium*, 8 (2007) 191-212.
- [3] J. Prista e A. Sousa Uva, A utilização de indicadores biológicos em saúde ocupacional, *Revista Portuguesa de Saúde Pública*, 6 (2006) 45-54.
- [4] H. Rosa, Biomonitoramento, 12º Congresso da ANAMT, maio 2004, Brasil.
- [5] ACGIH, Professional Exposure Limits to Chemical Agents at Workplace, E.U.A., 2009.
- [6] J.P. Sousa, M.L. Pereira e A. Rodrigues, Valores limite de exposição (VLE) a agentes químicos, *Revista Proelium* (2011).
- [7] Decreto-Lei n.º 247/89, DR – I Série, Nº 191, de 21 de agosto de 1989.

## ATUALIDADE CIENTÍFICA

### SEPARAÇÃO DE GASES USANDO NANOPOROS DE GRAFENO

Cientistas da Nova Zelândia, EUA e Alemanha, desenvolveram uma forma de usar grafeno para separar isótopos de hélio. Pela formação de orifícios à nanoescala, os investigadores calcularam que seria possível alterar a permeabilidade do grafeno de modo a permitir a passagem de isótopos hélio-3 e simultaneamente não permitir a passagem dos isótopos hélio-4. Esta abordagem tem aplicações potenciais na produção de hélio-3 para investigação científica, como também para a separação de gases noutros contextos. O hélio-3 está presente na atmosfera numa razão de 1,4 partes de hélio-3 por um milhão de partes de hélio-4. É usado extensivamente em investigação de processos de fusão e em química de baixa temperatura, sendo a maioria do hélio-3 obtido por decaimento radioativo de trítio. No entanto, a procura por hélio-3 tem aumentado consideravelmente nos últimos anos e a captura de hélio-3 das fontes terrestres de hélio ajudaria a satisfazer esta necessidade. Usando cálculos teóricos e simulações, os investigadores descobriram que a remoção de anéis de uma folha de grafeno permitia reduzir a sua barreira energética, o que determina a sua permeabilidade. No entanto, esta abordagem não era suficientemente sensível para atingir o potencial necessário para permitir a passagem do hélio-3 sem passar hélio-4. A funcionalização dos nanoporos criados permitiu aos investigadores modificar a barreira energética de modo a que a separação seja possível, descoberta que poderá um dia permitir uma separação dos dois isótopos com um fluxo gasoso industrialmente aceitável.

(adaptado de <http://www.rsc.org/chemistryworld/News/2012/May/graphene-nanopore-gas-separation-helium.asp>)

Helder Gomes (bquimica@ipb.pt) www.spq.pt

# All about **Heterogeneous,** **Homogeneous,** and **BioCatalysis**

## Editorial Board Chairmen:



Prof. Uwe Bornscheuer  
Greifswald University,  
Germany



Prof. Bert Weckhuysen  
Utrecht University,  
The Netherlands

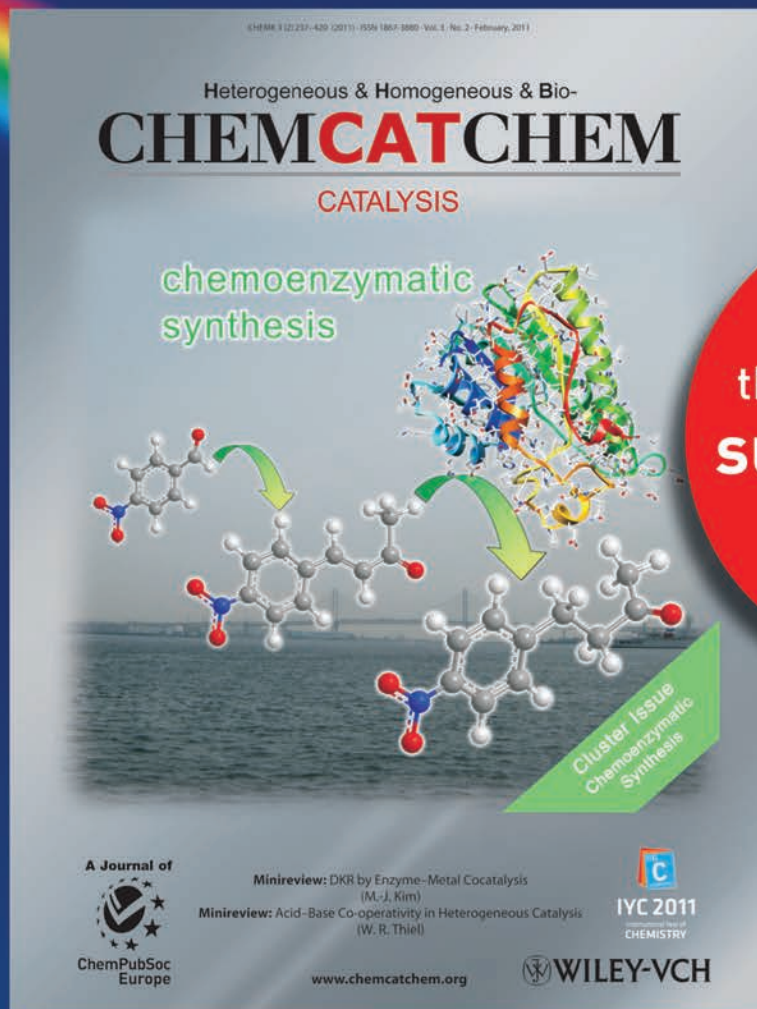


Prof. Luis A. Oro  
University of Zaragoza,  
Spain



## Focus

- heterogeneous catalysis
- homogeneous catalysis
- biocatalysis
- protein engineering
- whole cell catalysis
- electrocatalysis
- photocatalysis
- organocatalysis
- metal catalysis
- asymmetric catalysis
- industrial catalysis
- nanocatalysis
- catalytic processes
- surface reactions
- in situ techniques
- spectroscopic methods
- theoretical methods
- catalyst preparation



Discover  
the future and  
subscribe  
now!

A journal of



ChemPubSoc  
Europe

[www.chemcatchem.org](http://www.chemcatchem.org)

## “QUÍMICA POR TABELA 2.0” ESPETÁCULO PARA COMUNICAR CIÊNCIA

REGINA M. S. SOUSA<sup>1</sup>, PAULO RIBEIRO CLARO<sup>2,\*</sup>, BRIAN J. GOODFELLOW<sup>2</sup>

A capacidade da química para atrair a atenção dos jovens reside essencialmente no seu carácter experimental. As transformações proporcionadas pelas reações químicas são uma fonte inesgotável de fascínio, surpresa e descoberta.

A Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro estreou no Ano Internacional da Química o “Química por Tabela 2.0”, a segunda versão do seu espetáculo de demonstrações de química. A existência de uma atividade de demonstrações de química na programação permanente de um centro de ciência é uma mais-valia para a promoção da química entre a população em geral, e que deve ser aproveitada para motivar o interesse dos mais jovens para estudo desta ciência.



Os professores de ciências sabem que as atividades experimentais são fundamentais enquanto elemento motivador e vinculado aos sentidos, e também como metodologia de ensino e aprendizagem [1]. Isto é particularmente relevante no caso da química: por um lado, a profundidade e inter-relação dos conceitos fazem da química uma disciplina exigente ao nível da aprendizagem, mas, por outro lado, as transformações proporcionadas pelas reações químicas são uma fonte inesgotável de fascínio, surpresa e descoberta.

Deste modo, é importante proporcionar o contacto dos jovens com este carácter mais fascinante da química. E uma das formas de o fazer é através de espetáculos baseados em demonstrações de reações químicas, que proporcionam condições de aprendizagem não-formal e que po-

dem ser um complemento importante para o ensino formal.

A utilização de demonstrações de química como veículo de promoção e divulgação da ciência – e de despertar a curiosidade e incentivar o interesse dos alunos e do cidadão em geral – tem recebido a atenção de inúmeros autores, refletindo-se na publicação de livros especializados [2-6], no desenvolvimento de sítios da internet dedicados [7-10] e em publicações diversas [11-16].

Foi neste contexto que surgiu em 2008 o espetáculo para comunicar ciência “Química por Tabela” [17], desenvolvido para integrar a programação permanente da Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro e com o objetivo de promover o interesse pela química nos jovens e na sociedade em geral. Este espetáculo esteve em exibição desde fevereiro de 2008 a dezembro de 2010 e, durante este período, foram apresentados cerca de 150 espetáculos para quase 10000 participantes de todas as faixas etárias, sendo maioritariamente público escolar.

Da necessidade de renovação do “Química por Tabela” desenvolveu-se um novo espetáculo – designado “Química por Tabela 2.0” –, cuja estreia (a 6 de janeiro de 2011) coincidiu com o arranque do Ano Internacional da Química 2011 e, por isso, integrou as atividades comemorativas do evento. A existência de um espetáculo de demonstrações de química na programação permanente de um Centro de

Ciência não é usual. Para isso contribuem as características da própria química, que dificultam a manutenção de uma atividade de demonstrações que se repita várias vezes por semana, durante anos: as reações químicas consomem reagentes e produzem resíduos! Algumas das reações químicas mais espetaculares são – paradoxalmente – inexecutáveis num espetáculo regular: requerem uma preparação laboratorial morosa ou tecnicamente exigente, colocam problemas de segurança no local de exibição, envolvem reagentes de custo elevado, produzem resíduos perigosos e de difícil tratamento ... ou tudo isto ao mesmo tempo.

O desenvolvimento desta nova versão do “Química por Tabela” teve por objetivo melhorar estes aspetos relativamente à versão anterior: selecionar experiências simultaneamente espetaculares e mais ricas em conteúdos químicos; permitir a realização do espetáculo num anfiteatro em condições de segurança; minimizar a toxicidade dos reagentes utilizados; minimizar a produção de resíduos; e minimizar o custo de cada espetáculo.

Assim, o “Química por Tabela 2.0” apresenta um conjunto de onze novas demonstrações com maior impacto visual e mais ricas em conteúdos químicos – num fundo cénico de som, luz e imagem completamente renovado –, com menor toxicidade dos reagentes utilizados e menor quantidade de resíduos produzidos. A inclusão

<sup>1</sup> Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro

<sup>2</sup> Departamento de Química/CICECO, Universidade de Aveiro

\* E-mail: prc@ua.pt



de algumas experiências “recicláveis” contribui para a redução de resíduos e permite reduzir o custo de cada espetáculo.

Tal como sucedia com a sua versão anterior, também o “Química por Tabela 2.0” é apresentado durante cerca de 50 minutos, sendo o público convidado a participar na sequência das onze demonstrações químicas. A explicação para as várias experiências é dada pelos dois apresentadores e, sempre que possível, é feita a ligação entre a química inerente às experiências e o nosso dia-a-dia. Cada experiência é acompanhada pela projeção de um vídeo, que é parte integrante do espetáculo. O vídeo contribui para a criação da imagem da atividade, faz a associação entre a Tabela Periódica e os elementos químicos envolvidos nas reações apresentadas, inclui repetições de alguns detalhes das demonstrações previamente filmados e ainda animações explicativas que permitem uma melhor perceção dos fenómenos envolvidos.

Para este espetáculo foi também preparado um vídeo promocional que pode ser visualizado em [http://www.youtube.com/watch?v=4pJOHBAduTQ&list=PL4A9B025130CD945B&index=1&feature=plpp\\_video](http://www.youtube.com/watch?v=4pJOHBAduTQ&list=PL4A9B025130CD945B&index=1&feature=plpp_video).

As onze experiências apresentadas – que envolvem conceitos básicos de química, como ácido-base, oxidação-redução, precipitação, complexação, quimioluminescência e termoquímica, entre outros – são identificadas por designações que são também parte integrante do espetáculo:

### O CÂNTARO MÁGICO

Esta é uma experiência desenvolvida e adaptada pelos autores deste trabalho a partir de uma versão clássica mais simples, “The Magic Pitcher” [4].

É apresentado ao público um “Cântaro Mágico” (um erlenmeyer totalmente envolvido em papel prateado, que oculta o seu interior) e 3 erlenmeyers numerados contendo soluções incolores. O conteúdo do erlenmeyer 1 é adicionado ao “Cântaro Mágico” e reposto no erlenmeyer 1, apresentando agora uma tonalidade vermelha. Re-

pete-se o mesmo procedimento com o conteúdo do erlenmeyer 2 e obtém-se uma solução verde. Por fim, a adição do conteúdo do erlenmeyer 3 ao “Cântaro Mágico” produz uma solução com tonalidade violeta.

O público é desafiado a tentar explicar o que se passa, sabendo que o procedimento envolve indicadores ácido-base e soluções a diferentes valores de pH. Mas como conseguir obter três cores distintas a partir de três soluções incolores?

Quando a audiência é constituída por alunos do ensino secundário, é-lhes proposto que resolvam o desafio na sua escola.

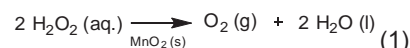
O “Cântaro Mágico” contém uma solução com indicador universal de Yamada, e esta solução nunca é totalmente vertida nos erlenmeyers 1-3. O indicador universal de Yamada é uma mistura de indicadores ácido-base (azul de timol, azul de bromotimol, vermelho de metilo e fenolftaleína) e apresenta mudanças de cor em diferentes faixas de pH (pH 1-4, vermelho; pH 5-6, laranja; pH 6-7, amarelo; pH 7-8, verde; pH 8-11, índigo; pH 11-14, violeta) [18]. A solução presente inicialmente no “Cântaro” encontra-se a pH=7 e as soluções presentes nos erlenmeyers 1-3 apresentam um valor de pH crescente. À medida que se vão adicionando os conteúdos dos erlenmeyers 1-3 ao cântaro, o valor de pH da solução vai variando, proporcionando as diferentes cores.

### GÉNIO DA QUÍMICA

O apresentador retira a rolha de um erlenmeyer (totalmente envolvido em

papel prateado, ocultando o seu interior), sem que nada aconteça. Mas quando retira a rolha com um chamamento do público, produz-se um fumo branco que atinge cerca de 1-2 metros de altura – liberta-se o “génio da química”!

No erlenmeyer encontra-se peróxido de hidrogénio e um eppendorf com dióxido de manganês, suspenso por um fio preso pela rolha. É possível retirar a rolha segurando o fio com o polegar, mas sem esse cuidado o eppendorf vira-se, e o dióxido de manganês catalisa a decomposição rápida do peróxido de hidrogénio. A reação é bastante exotérmica, levando à libertação de uma “nuvem” de vapor de água:



O mecanismo desta reação é bastante complexo, tendo sido apresentadas propostas de mecanismos por diversos autores [19, 20].

### PROBLEMA E SOLUÇÃO

Esta demonstração é também uma variante, desenvolvida pelos autores, de uma experiência clássica com reações endotérmicas espontâneas [21]. É pedido ao público que coloque uma nota (quanto maior o valor melhor!) dentro de uma caixa de madeira, com tampa. Posteriormente é criado um problema: como tirar a nota de dentro da caixa sem tocar na caixa com as mãos?

A solução “à químico” é obtida pela reação altamente endotérmica do hidróxido de bário octa-hidratado com cloreto de amónio. A reação ocorre num gobelé colocado sobre a tampa



Aspetto da bancada e da imagem de fundo durante a apresentação de “O Génio da Química” (com presença de um voluntário do público)

da caixa de madeira, previamente molhada. A solução formada arrefece o suficiente para provocar a solidificação da água (pode atingir os  $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), fazendo com que o gobelê fique “colado” à caixa e seja possível abrir a caixa “sem lhe tocar”.

O hidróxido de bário octa-hidratado reage com o cloreto de amônio, formando cloreto de bário di-hidratado, amônia e água (Equação (2)).

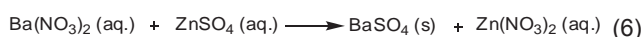
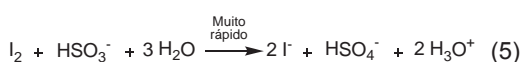
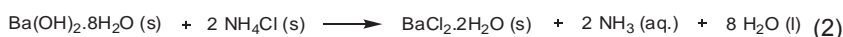
A reação ocorre entre os dois sólidos e origina uma mistura líquido-sólido. Trata-se de uma reação endotérmica cuja espontaneidade resulta da variação de entropia fortemente positiva associada à libertação das oito moléculas de água presentes no cristal de bário.

### SOBRESSATURAÇÃO

Uma solução sobressaturada de acetato de sódio é vertida sobre uma placa de petri. Apesar de parecer que não é possível verter toda a solução para um recipiente tão pequeno, esta cristaliza imediatamente sob a forma de “estalagmite”, e nem uma gota cai ao chão.

Uma solução aquosa sobressaturada de acetato de sódio pode permanecer indefinidamente intacta, mas quando é ligeiramente perturbada (por exemplo, pela presença de um cristal semente de acetato de sódio ou quando é ligeiramente agitada), ocorre a sua cristalização. Nesta demonstração, a cristalização é estimulada colocando alguns cristais de acetato de sódio na placa de petri. O processo de cristalização é exotérmico (o sólido resultante pode atingir os  $48\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) [22, 23].

A “estalagmite” cristalizada pode ser dissolvida e usada novamente. No entanto, é conveniente filtrar a quente para remover contaminações que causam a cristalização prematura e evaporar algum excesso de água.



### REAÇÃO OSCILANTE

Num gobelê, com agitação magnética, são adicionadas três soluções incolores originando uma solução inicialmente incolor, que se torna âmbar e, seguidamente, azul. Quando o público pensa que a cor azul é definitiva, a solução regressa ao âmbar, e de novo ao azul. Este ciclo de alternância de cores ocorre durante cerca de quinze minutos, terminando com a coloração azul.

Esta reação oscilante é obtida pela adição sequencial de três soluções: A (peróxido de hidrogénio), B (iodato de potássio dissolvido em água e ácido sulfúrico) e C (ácido malónico, sulfato de manganésio monohidratado e amido dissolvidos em água).

As cores na reação oscilante resultam da formação dos *intermediários de reação* ( $\text{I}^-$  e  $\text{I}_2$ ) e da presença de amido na solução. Inicialmente, não existe  $\text{I}^-$  ou  $\text{I}_2$ , e a solução é incolor. À medida que se forma  $\text{I}_2$ , a solução torna-se âmbar. Com o aumento da concentração de  $\text{I}_2$ , inicia-se a produção de  $\text{I}^-$ , o que leva à formação do complexo de  $\text{I}_2$  e  $\text{I}^-$  com o amido, responsável pela cor azul. Na etapa final do ciclo, as concentrações de  $\text{I}_2$  e  $\text{I}^-$  diminuem novamente e o complexo azul degrada-se. O ciclo recomeça com um novo aumento da concentração de  $\text{I}_2$ . Como o  $\text{I}_2$  e o  $\text{I}^-$  não são nem reagentes nem produtos finais da reação, o ciclo repete-se até a reação atingir o equilíbrio.

Esta demonstração combina dois tipos de reações oscilantes, combinação que é frequentemente designada por reação de Briggs-Rauscher [24]. O mecanismo global desta reação é bastante complexo, e não será discutido aqui, nem é apresentado no espetáculo. No entanto, os princípios básicos do mecanismo de reação oscilante – ao qual está associado o conceito de realimentação positiva

ou autocatálise – são apresentados à audiência através de uma animação simples, recorrendo ao modelo de Lotka-Volterra para um sistema predador-presa (raposas e coelhos) [25]

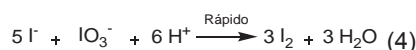
### CERVEJA SEM ÁLCOOL E LEITE SEM VACA

#### Cerveja sem álcool

Duas soluções incolores (A: solução aquosa de iodato de potássio; B: ácido sulfúrico concentrado, etanol e sulfito de sódio) são adicionadas, em simultâneo, num copo alto. A junção destas duas soluções origina uma surpreendente solução com tonalidade semelhante a cerveja, incluindo a espuma característica desta bebida. Nesta reação, o sulfito de hidrogénio produzido reduz a solução de iodato a iodeto:



O iodeto e o iodato reagem, sob condições ácidas, originando iodo elementar:



O iodo é, entretanto, reduzido muito rapidamente pelos iões de sulfito de hidrogénio a iões iodeto (Equação (5)).

A formação da “espuma de cerveja”, indispensável ao sucesso desta demonstração, é garantida com um pouco de detergente de louça incolor, adicionado previamente ao copo [2].

#### LEITE SEM VACA

Duas soluções incolores (A: solução aquosa de nitrato de bário; B: solução aquosa de sulfato de zinco) são adicionadas, em simultâneo, num copo, originando uma suspensão bastante semelhante a leite.

A reação do nitrato de bário com sulfato de zinco origina o precipitado branco de sulfato de bário [ $K_s = 1,08 \times 10^{-10}$ , a  $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ ] – Equação (6).

#### COBALTO EM EQUILÍBRIO

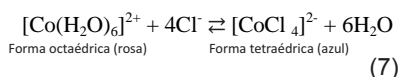
Esta é uma experiência que os alunos do 11.º ano facilmente relacionam com a matéria lecionada e que, em alguns casos, já realizaram ou irão realizar na sua escola. A integração desta experi-

ência no espetáculo pretende justamente criar um ponto de ligação muito óbvio com a aprendizagem na escola.

Dois tubos de vidro fechados contendo uma solução de cloreto de cobalto hexa-hidratado, à temperatura ambiente, são submetidos a variações de temperatura. A solução do tubo que é colocado num gobelé com água quente (cerca 90 °C) altera a sua tonalidade inicial violeta para azul, ao passo que a que é colocada em água fria (cerca 5 °C) muda para rosa.

Esta experiência pode ser repetida várias vezes durante o espetáculo e é reutilizável, proporcionando um menor custo e menos resíduos.

O ião cobalto (II) apresenta diferentes cores dependendo do tipo de ligando e da forma como os ligandos se encontram ligados a ele:



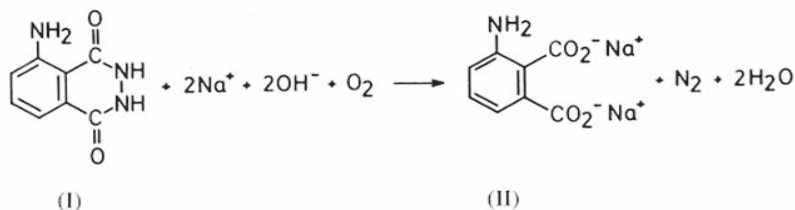
(7)

Numa solução fria de cloreto de cobalto hexa-hidratado ( $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) em etanol, o ião complexo encontra-se na forma geométrica octaédrica e apresenta a coloração rosa. A reação direta é endotérmica, pelo que o aquecimento da solução desvia o equilíbrio para o lado dos produtos, originando um ião complexo com quatro ligandos cloreto e com geometria tetraédrica. A cor deste complexo é azul [26].

## QUIMIOLUMINESCÊNCIA

Os reagentes, em solução aquosa, são colocados em duas ampolas de decantação ligadas a um tubo de vidro em espiral. Quando se abrem as torneiras, as soluções misturam-se e a reação inicia-se. A mistura percorre a espiral de vidro sendo recolhida em dois copos, um contendo alguns miligramas de fluoresceína e outro de rodamina B. Em condições de baixa luminosidade, a espiral ilumina-se com a luminescência azul característica do luminol, enquanto uma das soluções num dos copos emite a luminescência verde característica da fluoresceína e a outra emite a luminescência rosa característica da rodamina B.

O luminol (I), em solução alcalina, exibe quimioluminescência na presença



(8)

de água oxigenada (oxidante). A intensidade pode ser aumentada por catalisadores como  $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ , que também aumentam a rapidez do decaimento da emissão de luz. Durante a reação, o luminol é convertido a sal disódico do ácido 3-aminoftálico (II): a adição de fluoresceína e de rodamina B à mistura de reação resulta numa emissão de coloração amarela-esverdeada, devido à emissão de fluorescência da fluoresceína e de emissão rosa devido à emissão de fluorescência da rodamina B. Nestes casos ocorre uma transferência de energia do aminoftalato (II) excitado para a fluoresceína e rodamina B, gerando o estado excitado destas últimas, o qual decai para o estado fundamental, acompanhado pela emissão de fluorescência [27, 28].

## GARRAFÃO COM ÁLCOOL

Esta é uma reação também designada por “reação de *quase-exploração* com etanol”. A combustão rápida do vapor de uma pequena quantidade de etanol, dentro de um garrafão de vidro incolor, ligeiramente aquecido, origina um som violento e, em condições de baixa luminosidade, observa-se uma chama azul percorrer todo o garrafão. O ponto de ignição do vapor de etanol (*flash point*) é 12 °C. O vapor de álcool existente no garrafão arde muito rapidamente e o som produzido deve-se à deslocação de ar provocada pela diferença de pressão dentro do garrafão.

## AS CORES DA TABELA PERIÓDICA

A combustão de etanol num gel com diferentes sais origina chamas coloridas que, em condições de baixa luminosidade, proporcionam um efeito espetacular.

A combustão do etanol em contacto com diferentes sais permite observar os espectros de emissão atômica dos

seus cátions (K – violeta; Li – rosa; Sr – vermelho; Cu – azul-esverdeado; B – verde; espécies usadas no “fogo de artifício”). Tal como na produção de “fogo de artifício”, tem de ser evitada a contaminação dos reagentes por sais de sódio, já que a forte emissão amarela do ião sódio se sobrepõe a todas as outras [29].

## DESCOBRIR A PÓLVORA

“Descobrir a pólvora” é a experiência de encerramento do espetáculo.

Inicialmente, mistura-se pólvora comum, pólvora de rojão (ou pólvora *flash*) [30], e pó de alumínio, de ferro e de magnésio num copo ou erlenmeyer de boca larga.

O copo é colocado num espaço circundante escurecido, e incendiado com uma “vela mágica” (ou “sparkler”, pequeno bastão que arde sem chama, libertando fagulhas, utilizado, por exemplo, em bolos de aniversário).

A combustão da mistura origina um autêntico “fogo de artifício” que atinge uma altura de cerca de 2 metros.

A combustão da mistura de pólvora e pólvora de rojão projeta os fragmentos de metal no ar e, ao mesmo tempo, provoca a sua ignição, com a correspondente emissão de luz. O magnésio, ferro e alumínio são convertidos nos respetivos óxidos  $\text{MgO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [2].

O “*Química por Tabela 2.0*” estreou a 6 de janeiro de 2011 - como atividade comemorativa do Ano Internacional da Química 2011 - e, até ao presente, soma 50 espetáculos com a participação de mais de 7000 pessoas, de todas as idades, sendo maioritariamente público escolar. Este espetáculo tem sido apresentado na Fábrica Centro



*Ciência Viva de Aveiro (34 espetáculos e cerca 1800 participantes) e em regime de itinerância (16 espetáculos e cerca de 5300 participantes). Neste último caso, a dinamização em escolas, autarquias, empresas, centros de ciência e universidades tem proporcionado atingir públicos que não frequentam centros de ciência ou o centro de ciência de Aveiro em particular.*

## REFERÊNCIAS

- [1] M. Giordan, "O Papel da Experimentação no Ensino de Ciências," *Química Nova na Escola* 10 (1999) 43-49.
- [2] H.W. Roesky e K. Mockel, "Chemical Curiosities", Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2003.
- [3] H.W. Roesky, "Spectacular Chemical Experiments", Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2007.
- [4] C. Schrempp, "Bangs, Flashes, and Explosions", ExploScience Publications, Alta Loma, California, 2007.
- [5] K. Hutchings, I. Bertin, "Classic Chemistry Experiments", Royal Society of Chemistry, 2000.
- [6] B.Z. Shakhshiri, "Chemical Demonstrations: A Handbook for Teachers of Chemistry", vol. 1 a 4, The University of Wisconsin Press, 1981-1992.
- [7] UoL Department of Chemistry, "Delights of Chemistry". <http://www.chem.leeds.ac.uk/delights/> [visitado em abril 2012]
- [8] EaPSR Council, "Making the Chemical Connection" <http://www.chemicalconnection.org.uk/> [visitado em abril 2012]
- [9] "The Chemistry Outreach Website", <http://boyles.sdsmt.edu/> [visitado em abril 2012]
- [10] G. Rayner-Canham, "Chemistry's Everywhere! Show", <http://www.swgc.mun.ca/chem/Pages/chem-show.aspx> [visitado em abril de 2012]
- [11] A. Arroio, K.M. Honorio, K.C. Weber, P. Homem-de-Mello, M.T.D.P. Garnbardella, A.B.E.D. da Silva, "The Chemistry Show: Motivating the Scientific Interest" *Química Nova* 29 (2006) 173-178.
- [12] J.A. Vanin, "Picturing the Chemical Relevance", *J. Chem. Educ.* 68 (1991) 652-54.
- [13] M.D.C. Galiuzzi, F.P. Goncalves, "The Pedagogical Nature of Experimental Activities: Research in a Teaching Credentials Course in Chemistry", *Química Nova* 27 (2004) 326-31.
- [14] M.N. Borges, C.M.R. Ribeiro, D.R. Araripe, E.P. Chacon, L.G.R. Coutinho e D.M. Luz, "Ações de Divulgação de Química na Casa da Descoberta - Centro de Divulgação de Ciência da Universidade Federal Fluminense", *Química Nova* 34 (2011) 1856-1861.
- [15] H.W. Kerby, J. Cantor, M. Weiland, C. Babiarz, A.W. Kerby, "Fusion Science Theater Presents the Amazing Chemical Circus: a New Model of Outreach that uses Theater to Engage Children in Learning", *J. Chem. Educ.* 87 (2010) 1024-1030.
- [16] R. Peleg e A. Baram-Tsabari, "Atom Surprise: using Theatre in Primary Science Education", *J. Sci. Educ. Technol.* 20 (2011) 508-524.
- [17] P. Ribeiro-Claro, B.J. Goodfellow et al, "Química por Tabela" - Espetáculo para Comunicação de Ciência", *Química* 110 (28) 5-9.
- [18] L. Foster e I.J. Grunfest, "Demonstration Experiments using Universal Indicators", *J. Chem. Educ.* 14 (1937) 274-276.
- [19] S.H. Do, B. Batchelor, H.K. Lee e S.H. Kong, "Hydrogen Peroxide Decomposition on Manganese Oxide (Pyrolusite): Kinetics, Intermediates, and Mechanism," *Chemosphere* 75 (2009) 8-12.
- [20] H. Zhou, Y.F. Shen, J.Y. Wang, X. Chen, C. O'Young e S.L. Suib, "Studies of Decomposition of  $H_2O_2$  over Manganese Oxide Octahedral Molecular Sieve Materials," *J. Catal.* 176 (1998) 321-328.
- [21] A.N. Hambly, "A Spontaneous Endothermic Reaction", *J. Chem. Educ.* 46 (1969) A55.
- [22] J. Guémez, C. Fiolhais e M. Fiolhais, "Quantitative Experiments on Saturated Solutions for the Undergraduate Thermodynamics Laboratory", *Eur. J. Phys.*, 26 (2005) 25-31.
- [23] E.K. Bacon, "Miscellaneous Experiments", *J. Chem. Educ.* 25 (1948) 251-252.
- [24] T.S. Briggs and W.C. Rauscher, "An Oscillating Iodine Clock", *J. Chem. Educ.* 50 (1973) 496.
- [25] A.J. Lotka, "Contribution to the Theory of Periodic Reactions", *J. Phys. Chem.* 14 (1910) 271-274.
- [26] M.J. DeGrand, M.L. Abrams, J.L. Jenkins e L.E. Welch, "Gibbs Energy Changes During Cobalt Complexation: a Thermodynamics Experiment for the General Chemistry Laboratory", *J. Chem. Educ.* 88 (2011) 634-636.
- [27] E.H. White, H.H. Kagi, J.H.M. Hill, O. Zafiriou, "Chemiluminescence of Luminol: the Chemical Reaction", *J. Am. Chem. Soc.* 86 (1964). 940-941.
- [28] E.H. White, M.M. Bursley, "Chemiluminescence of Luminol and Related Hydrazides", *J. Am. Chem. Soc.* 86 (1964) 941-942.
- [29] G.M. McKelvy, "Flame Tests That Are Portable, Storable, and Easy To Use", *J. Chem. Educ.* 75 (1998) 55.
- [30] Fornecidos por GJR Pirotecnia e Explosivos S.A. - Penafiel.



O Química por Tabela 2.0 visto por um (muito) jovem artista: "Descobrir a Pólvora - esta experiência foi mega fixe!"



# ChemistryViews

Brought to you by



ChemPubSoc  
Europe



WILEY-VCH

- The best chemistry content
- Exciting news, education, entertainment and multi-media
- Fast track to unique articles and 16 society platforms with the new online magazine



Spot your favorite  
content at

[www.ChemistryViews.org](http://www.ChemistryViews.org)

 WILEY-VCH



ChemPubSoc  
Europe



## ACERTO DE EQUAÇÕES QUÍMICAS

EMANUEL ALEXANDRE COUTINHO DE FREITAS REIS<sup>1,2</sup>,  
JOÃO CARLOS MATOS PAIVA<sup>1,\*</sup>

A utilização do computador e da internet está generalizada entre os atuais alunos do 3.º ciclo. Os “nativos digitais” que hoje se sentam nos bancos da escola gostam de usar computadores [1] e usam-nos em diversos contextos, dentro e fora de aula. Uma das atividades que os alunos realizam com bastante frequência é o processamento de texto. O Microsoft Word é o processador de texto mais disseminado, pelo que é um programa com que os alunos estão bastante familiarizados, embora possam não dominar algumas funcionalidades mais específicas.

A Atividade com os Pais no Computador (APC) que apresentamos utiliza o Microsoft Word, não só como processador de texto, mas também como ambiente para a aprendizagem da escrita e acerto de equações químicas. As APC's são atividades em que o aluno é convidado a realizar em casa, com o auxílio de familiares (pai, mãe ou outro), uma série de tarefas de cariz tendencialmente investigativo que envolvem o uso do computador.

São várias as virtudes que têm vindo a ser apontadas a uma APC [2]:

- Promove o envolvimento ativo do aluno e compromete-o com o seu processo de aprendizagem;
- Envolve e responsabiliza o Encarregado de Educação nas aprendizagens do aluno;
- Promove o desenvolvimento e a mobilização de saberes/competências de diversas áreas no aluno;
- Incentiva o uso do computador como uma ferramenta de produção e não apenas como um meio de consulta;
- Promove e desenvolve no aluno capacidades de trabalho colaborativo/cooperativo.

O acerto das equações químicas, assunto tratado nesta atividade, é crucial no estudo da química, mas nem sempre é de aprendizagem imediata. O caráter iterativo do processo de acerto torna-o algo misterioso para alguns alunos [3].

No ensino oficial português [4], o acerto de equações químicas é lecionado no oitavo ano, no âmbito do tema “Sustentabilidade da Terra”, apenas algumas aulas após os alunos terem sido introduzidos na escrita de fórmulas químicas e estudado o significado qualitativo e quantitativo das mesmas. Se estes assuntos não estiverem aprendidos de forma significativa, a introdução dos coeficientes estequiométricos no processo de acerto é problemática, pois os alunos confundem com facilidade os significados associados aos vários números que compõem a equação química.

Esta APC, pensada de acordo com as orientações curriculares oficiais da disciplina de físico-química para o oitavo ano, foi elaborada com o intuito de desenvolver nos alunos uma perspetiva estrutural que contribua para que o acerto das equações químicas não seja visto pelos alunos como um mero exercício de palpite. Evidencia-se a relação entre o acerto de uma equação química e a conservação de átomos ocorrida durante uma reação.

Consideramos também que esta APC apresenta ainda a vantagem de mobilizar funcionalidades do Microsoft Word que, apesar de úteis, alguns alunos no oitavo ano poderão dominar mal ou desconhecer, tais como o editor de equações, a funcionalidade agrupar/desagrupar, ou as definições de moldagem de imagens. A capacidade de escrita de fórmulas químicas e de equações químicas em processadores de texto, por exemplo, será uma competência importante para a elaboração de relatórios em momentos posteriores.

A realização desta APC implica que o aluno já tenha sido introduzido previamente na leitura e elaboração de “equações de palavras”. Adicionalmente, o professor deverá procurar assegurar-se que todos os alunos têm possibilidade de ter auxílio na realização da atividade. De facto, embora seja um fenómeno pouco estudado, têm sido apontadas sensibilidades associadas aos contextos sociais, económicos e culturais que podem condicionar o desempenho do aluno nestas atividades envolvendo a parentalidade. Recomenda-se, por isso, que o professor permita que a atividade, sendo necessário, possa ser realizada com a ajuda de outros elementos que não os pais, sejam eles da família ou não. Em caso limite, se um aluno comprovadamente não tiver possibilidade de arranjar uma ajuda efetiva para a realização da APC fora do contexto escolar, o professor deverá procurar providenciar um auxílio dentro da própria escola (por exemplo, um professor de apoio ou um aluno de um ano de escolaridade superior).

### REFERÊNCIAS

- [1] Paiva, Jacinta (2003) – As Tecnologias de Informação e Comunicação: A utilização pelos Alunos. Lisboa. Nónio Séc. XXI/Dapp.
- [2] Paiva, João – *Boletim da Sociedade Portuguesa de Química*, 2010, 118, 57-63.
- [3] Chemistry Misconceptions, acessível em: <http://www.scientificsonline.com/paper-clip-coefficient-balancing-chemical-equations-manipulative.html> [consultado em 6/01/2012].
- [4] Departamento da Educação Básica – Orientações Curriculares 3º Ciclo: Ciências Físicas e Naturais – Ministério da Educação, junho de 2001 – acessível em: [http://sitio.dgdc.min-edu.pt/recursos/Lists/Repositrio%20Recursos2/Attachments/176/orientcurric\\_ciencias\\_fisicas\\_naturais.pdf](http://sitio.dgdc.min-edu.pt/recursos/Lists/Repositrio%20Recursos2/Attachments/176/orientcurric_ciencias_fisicas_naturais.pdf) [consultado em 6/01/2012].

<sup>1</sup> Centro de Investigação em Química, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto, Rua do Campo Alegre, 687, 4169-007 Porto

<sup>2</sup> Escola Secundária António Sérgio, Av. Nuno Álvares, s/n, 4400-233 Gaia

\* E-mail: [jcpaiva@fc.up.pt](mailto:jcpaiva@fc.up.pt)



# Made in Europe for the World



ChemPubSoc  
Europe

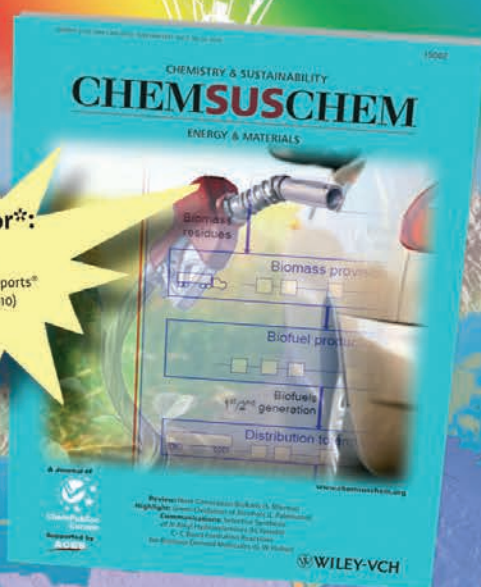
2011. Volume 4. 12 Issues  
ISSN print 1864-5631  
ISSN electronic 1864-564X

## ChemSusChem

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

 **WILEY**  
ONLINE LIBRARY  
wileyonlinelibrary.com

Impact Factor<sup>®</sup>:  
**4.767**  
\*2009 Journal Citation Reports<sup>™</sup>  
(Thomson Reuters, 2010)



Supported by

**ACES**

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

cs-journals@wiley.com (Americas, Europe, Middle  
East and Africa, Asia Pacific)

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

cs-japan@wiley.com (Japan)

[www.chemsuschem.org](http://www.chemsuschem.org)

 **WILEY-VCH**

## Atividades com os Pais no Computador (APC)



### Acerto de equações químicas

Emanuel Alexandre Coutinho de Freitas Reis<sup>1,2</sup>  
João Carlos Matos Paiva<sup>1</sup>

1 Centro de Investigação em Química, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto, Rua do Campo Alegre, 687, 4169-007 Porto  
2 Escola Secundária António Sérgio, Av. Nuno Álvares, s/n, 4400-233 Gaia

#### A – Caros alunos e pais/familiares:



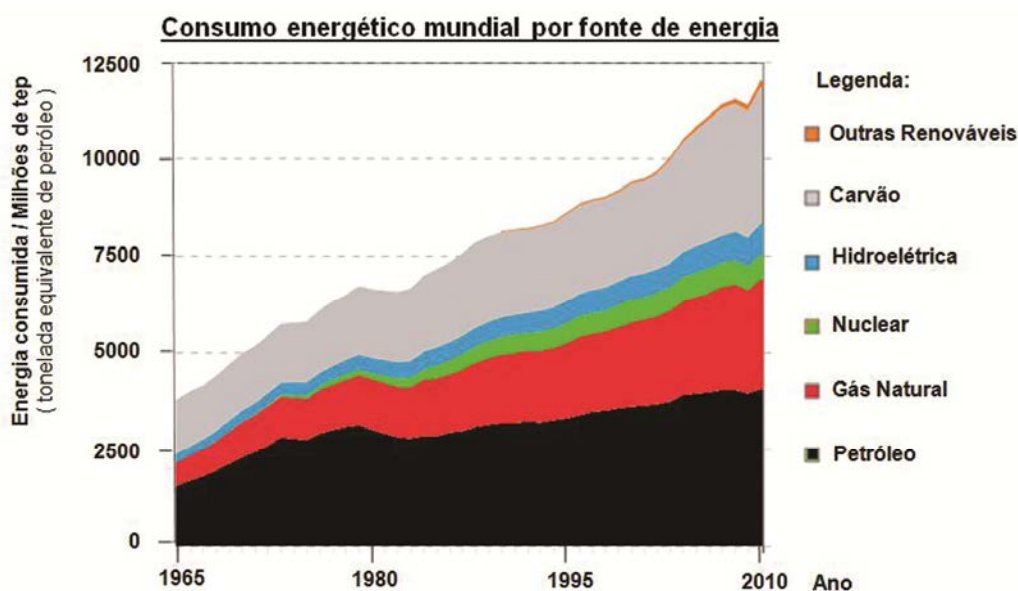
Nesta atividade propomos que em conjunto descubram o que acontece quando alguns combustíveis são usados na obtenção de energia e a maneira correta de representar as reações químicas que ocorrem nesses processos.

É muito importante que sigam todas as indicações que vos forem sendo apresentadas. O trabalho deverá ser entregue ao professor com este enunciado, devendo ser elaborado em formato digital, e entregue sob a forma de um ficheiro de texto, ou impresso numa folha de papel. Neste último caso, o cronograma e as figuras deverão ser impressas e coladas na folha a entregar. A secção **C** é para ser realizada individualmente pelo(a) aluno(a). Nas secções **D**, **E** e **F** constam as tarefas que o(a) aluno(a) e os pais (ou familiares) realizarão em conjunto. Bom trabalho e obrigado pela colaboração!

#### B – Contexto:



As necessidades energéticas do Homem têm sido satisfeitas em larga medida à custa de reações de combustão. Os combustíveis fósseis tiveram, e continuam a ter, um papel importantíssimo no mundo.



Dados de *BP Statistical Review of World Energy 2011* consultados em <http://www.bp.com>

No entanto, os cientistas sabem hoje que a utilização maciça de combustíveis fósseis como fonte de energia é problemática. Os produtos resultantes da queima de combustíveis fósseis afetam fortemente os equilíbrios naturais do planeta, pondo em risco diversos habitats e, no limite, a própria sobrevivência do Homem.



### C – Área de trabalho individual:



Nesta atividade vais investigar o que se passa durante as reações químicas e entender como são descritas pelos químicos. Aprofundarás também os teus conhecimentos sobre as consequências da utilização dos combustíveis fósseis. Mas antes disso será importante recordar alguns assuntos.

**C.1.** Faz a distinção entre as seguintes unidades estruturais da matéria: átomo, molécula e ião.

**C.2.** Apresenta o significado de substância elementar, substância composta e mistura.

**C.3.** Distingue combustível de comburente.

**C.4.** Regista o significado dos símbolos usados em equações de palavras.

### D – Área de trabalho colaborativo pais/alunos:



Dentro da área sombreada encontra um texto sobre a combustão de combustíveis fósseis.

#### As combustões dos combustíveis fósseis.

Existem três grandes tipos de combustíveis fósseis, o **carvão**, o **petróleo** e o **gás natural**. O nome fóssil surge pelo facto de serem originados à custa da \_\_\_\_\_ de matéria viva ao longo de milhões de anos. Como a sua regeneração é muito \_\_\_\_\_, os combustíveis fósseis constituem uma fonte de energia finita.

Desde a antiguidade que o homem utiliza o **carvão** como forma de energia, mas o consumo deste combustível teve um forte crescimento a partir da Revolução \_\_\_\_\_, em consequência das necessidades energéticas resultantes do aparecimento das máquinas a vapor. O principal constituinte do carvão é o carbono. Quando o carvão é queimado num ambiente \_\_\_\_\_ em oxigénio, os átomos de carbono combinam-se com moléculas diatómicas de oxigénio, originando dióxido de carbono.

No entanto, se a queima do carvão ocorrer num ambiente em que a quantidade de oxigénio disponível não é a ideal, resultará da combustão monóxido de carbono.

O **petróleo** é uma rocha líquida constituída essencialmente por \_\_\_\_\_ (nome dado às substâncias que são constituídas apenas por hidrogénio e carbono).

Existem registos da utilização do petróleo para calafetação, pavimentação, aquecimento e iluminação, desde 4000 a.C. no \_\_\_\_\_, zona onde aparecia frequentemente à superfície e de onde ainda hoje é extraído em maior quantidade. No entanto, a exploração petrolífera moderna começou apenas no século \_\_\_\_\_. Após ser extraído, o petróleo é enviado para \_\_\_\_\_. O petróleo é então submetido a uma série de operações, sendo a mais importante a \_\_\_\_\_, de que resultam diversos materiais \_\_\_\_\_, como a gasolina. A gasolina é uma mistura líquida de várias substâncias. Uma dessas substâncias é o hexano, de cuja combustão resulta a formação de dióxido de carbono e vapor de água.

O **gás natural** é uma mistura gasosa, constituída também por \_\_\_\_\_, como acontece no petróleo, só que mais \_\_\_\_\_. O constituinte mais abundante no gás natural (cerca de 70%) é o metano. Quando o metano é queimado forma-se dióxido de carbono e vapor de água.

**D.1.** Procura descobrir as palavras em falta no texto anterior. Se considerares necessário, podes recorrer a outras fontes de informação como sítios da internet, livros, etc.

**D.2.** A partir das informações do texto, escreve as “equações de palavras” (não te esqueças de indicar corretamente os estados físicos das substâncias) relativas às reações de combustão:

**Reação A)** do carvão em meios ricos em oxigénio

**Reação B)** do carvão em meios pobres em oxigénio

**Reação C)** do metano

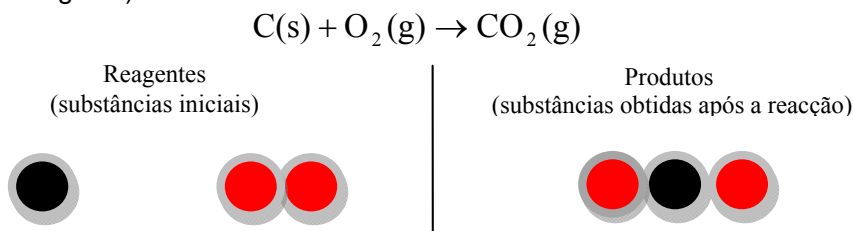
**Reação D)** do hexano



**D.3.** Para cada equação de palavras, escreve o respetivo esquema químico, substituindo o nome das substâncias que intervêm na reação pelas suas fórmulas químicas. Para elaborares o esquema químico de cada reação deves recorrer ao editor de equações do Microsoft Word, o Microsoft Equation.

**Nota:** Podes aceder ao Microsoft Equation, selecionando o menu inserir e a opção objeto no Microsoft Word. O tipo de letra pode ser alterado na opção “estilos”.

**D.4.** Observa o exemplo seguinte, relativo à reação **A** (reação de combustão do carvão em meios ricos em oxigénio):



Para cada uma das substâncias que participam nas reações **B**, **C** e **D**, investiga, usando a Internet, como são as unidades estruturais dessas substâncias.

Elabora, usando a funcionalidade “inserir formas automáticas” do Microsoft Word, o esboço das unidades estruturais de cada uma das substâncias intervenientes e posiciona-os por baixo do esquema químico. Representa com a mesma cor átomos que sejam do mesmo elemento.

No caso das unidades estruturais serem moléculas, quando terminares o esboço de cada molécula, agrupa os elementos que integram esse esboço, para que o Word o considere como um só objeto.

**Nota:** Podes agrupar uma imagem no Microsoft Word clicando sucessivamente nos elementos que queres agrupar enquanto manténs a tecla CTRL premida. Quando tiveres selecionado todos os itens, coloca o ponteiro do rato sobre um dos elementos selecionados e clica no botão direito do rato, escolhendo a opção agrupamento/agrupar no menu que então surge. Para desagrupar um grupo de imagens, o procedimento é semelhante, bastando apenas escolher a opção desagrupar.

**D.5.** Se observares o exemplo apresentado em **D.4.**, para a reação **A**, podes constatar que durante a reação química houve conservação de átomos: todos os átomos existentes nos reagentes estão presentes nos produtos da reação, embora combinados de forma diferente. Esta característica vai de encontro ao proposto por Antoine Lavoisier no século XVII.

### “Na Natureza nada se cria e nada se perde, tudo se transforma”

A Lei de Lavoisier é tão importante na Química, que Lavoisier é considerado o pai da Química moderna.

No entanto, os diagramas que construístes para as reações **B**, **C** e **D** ainda não obedecem a esta Lei; é necessário considerar a participação de mais unidades estruturais.

Para as reações **B**, **C** e **D**, utiliza a funcionalidade copiar/colar do Microsoft Word para replicar unidades estruturais de reagentes ou de produtos.

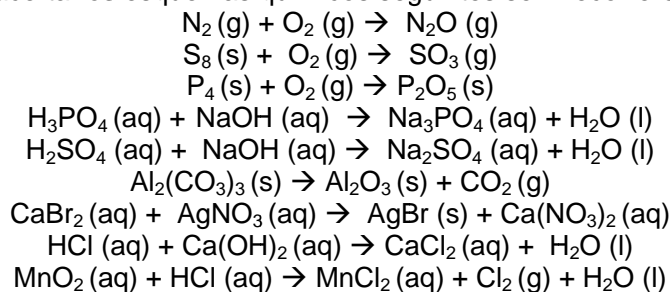
Procura estabelecer a situação que respeite a Lei de Lavoisier e que envolva o menor número de átomos possível, colando as unidades estruturais replicadas por baixo das que usaste como modelo.

**D.6.** Para as reações **B**, **C** e **D**, contabiliza o número de vezes que replicaste o diagrama da unidade estrutural de cada uma das substâncias que intervêm na reação. Esse número é o coeficiente estequiométrico. No esquema químico de cada uma das reações, adiciona os coeficientes estequiométricos respetivos imediatamente antes da fórmula química das substâncias.

**Nota:** O coeficiente estequiométrico 1 nunca surge na equação, pois considera-se subentendido pela presença da fórmula química na equação.

Ao realizares o acerto do esquema químico por adição dos coeficientes estequiométricos de forma a estar de acordo com a Lei de Lavoisier, obténs a **equação química da reação**.

**D.7.** Procura agora acertar os esquemas químicos seguintes sem recorrer a diagramas:



**D.8.** Envia o documento Word com o teu trabalho por correio eletrónico para o teu professor, ou imprime-o e entrega-o ao professor na próxima aula.

### E – Para continuar:



**E.1.** Apesar desta investigação, poderão ter ficado algumas dúvidas ainda no ar. Deverão ser registadas todas as questões que subsistam para depois o aluno tentar esclarecer na escola com o auxílio do professor e dos colegas de turma.

**E.2.** Elabora uma apresentação sobre os problemas ambientais causados pela utilização dos combustíveis fósseis que inclua as equações químicas que escreveste em **D.2.**

**E.3.** Investiga que avanços recentes ocorreram na procura e utilização de fontes de energia alternativas. Elabora um texto baseado na informação por ti recolhida que evidencie as dificuldades associadas à utilização de energias alternativas.

**E.4.** Devido à importância da Lei que propôs, Antoine Lavoisier é frequentemente considerado o pai da Química moderna. No entanto, a vida de Lavoisier foi muito rica! Pesquisa e elabora uma pequena biografia de Lavoisier.

### F – Avaliação dos intervenientes:



Muito obrigado! Antes de mais, queremos agradecer pela colaboração e por todo o empenho colocado na realização desta atividade. Pedimos, por favor, que façam o preenchimento da tabela seguinte assinalando com X a coluna que melhor corresponde à vossa opinião sobre o item em observação. **Escala:** 1- Muito Mau; 2- Mau; 3- Razoável; 4- Bom; 5- Muito Bom.

		1	2	3	4	5
1 – O que achei do desafio inerente à atividade?	Pais					
	Aluno					
2 – Como foi o meu desempenho nas questões técnicas, com o computador?	Pais					
	Aluno					
3 – Como foi o nosso nível de diálogo?	Pais					
	Aluno					
4 – Contributo para a melhoria dos conhecimentos científicos?	Pais					
	Aluno					
5 – Contributos para melhorar a vida, pessoal e em sociedade?	Pais					
	Aluno					
6 – Contributos da atividade para relacionar harmoniosamente o computador, o estudo e o diálogo familiar?	Pais					
	Aluno					
7 – Como estava a proposta inerente à atividade em termos de clareza, motivação e recursos fornecidos?	Pais					
	Aluno					
8 – Na globalidade como avalio esta atividade?	Pais					
	Aluno					

Outras observações: \_\_\_\_\_

Grato, o Professor \_\_\_\_\_

## Química para os mais novos

**Marta C. Corvo**

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



### Introdução

Na primeira atividade propõe-se investigar as estranhas características de um fluido não-Newtoniano: parece um líquido mas também parece um sólido ... o que está a acontecer? Na segunda atividade vamos fazer uma fibra a partir de um polímero. Alguns polímeros são constituídos por cadeias longas que podem ser puxadas e enroladas em forma de fibras, será que conseguimos?

### 1- Areias movediças

#### Material:

- Amido de milho
- Água
- Tabuleiro
- Corante alimentar (opcional)
- Copo



#### Procedimento:

1. Transferir  $\frac{1}{2}$  copo de água para o recipiente de plástico.
2. Adicionar 4 gotas de corante alimentar à água (opcional).
3. Adicionar lentamente um copo de amido de milho à água, misturando progressivamente.
4. Pode ser necessário adicionar mais um pouco de amido de milho ou de água. A mistura deve ficar com uma textura semelhante à do mel. Deixar a mistura repousar por alguns minutos.
5. As areias movediças estão prontas!



6. Experimentar baixar as mãos rapidamente por cima da mistura. Depois introduzir lentamente as mãos dentro da mistura. O comportamento é o mesmo? Experimentar mexer os dedos dentro da mistura rapidamente e depois lentamente.
7. Experimentar comprimir com as duas mãos esta mistura tentando formar uma bola. Depois abrir as mãos e observar o que acontece.
8. Atenção: quando for necessário descartar, colocar no lixo e nunca no esgoto.



#### Explicação:

A mistura de amido com água forma uma suspensão e não uma solução, pois o amido não se dissolve na água. Esta mistura tem a particularidade de às vezes parecer mais líquida e outras vezes parecer mais sólida. Todos os líquidos possuem uma propriedade chamada de viscosidade que caracteriza a sua fluidez, ou seja, o modo como o líquido se desloca. Quando a viscosidade é sempre a mesma, diz-se que o fluido é Newtoniano. Na mistura que fizemos, a viscosidade não é constante, depende da força que lhe aplicamos – se aplicarmos pouca força, ficará pouco viscosa e parecerá água, se lhe aplicarmos uma força maior, ficará mais viscosa e mover-se-á mais dificilmente. Diz-se que é um fluido não-Newtoniano. Outro exemplo de fluido não-Newtoniano são as areias movediças, misturas de areia e água (ou ar), que parecem sólidas, mas que ficam instáveis quando perturbadas. Nas areias movediças, quanto maior pressão se aplicar, mais difíceis serão os movimentos, porque ficarão quase sólidas.

## II- À procura da fibra

**Atenção:** A acetona é inflamável e bastante volátil. Não se deve aproximar de chamas ou fontes de aquecimento. Fazer a experiência em zonas bem ventiladas. Utilizar óculos de segurança.

### Material:

- Cola branca (PVA)
- Lápis
- Acetona
- Água
- Palitos
- Óculos de segurança



### Procedimento:

1. Colocar cerca de 1 cm de cola no fundo do copo de vidro.
2. Mergulhar uma ponta de um palito na cola e retirar. Observar que a cola não se agarra ao palito.



3. Incliná-lo um pouco e adicionar igual quantidade de acetona sobre a cola.
4. Tocar com outro palito na zona onde as duas camadas (acetona e cola) se juntam. Com a ponta do palito levantar uma ponta da cola para fora. Esta parte é difícil, será necessário tentar algumas vezes. Quando se conseguir apanhar uma fibra, levantar para fora do copo e começar a enrolar em torno do lápis. Atenção, o lápis não pode ter tinta a revestir (se este



for o caso remover a tinta com acetona e papel absorvente, depois descartar o papel absorvente em local bem ventilado).

5. Enrolar a fibra em torno do lápis imediatamente acima do copo. (Cuidado, a fibra é muito frágil).



6. Lavar o copo com bastante água.
7. Retirar os óculos de segurança e deixar que a fibra seque num local bem ventilado.

#### Explicação:

Um polímero é uma substância constituída por unidades mais pequenas que se repetem, e que estão ligadas entre si, formando cadeias longas. Estas unidades chamam-se monómeros. A cola branca é uma mistura que contém um polímero chamado acetato de polivinilo (PVA, do inglês *polyvinyl acetate*), além de água e outras substâncias. Quando adicionámos acetona à cola, ela dissolveu a água existente na mesma. Ao retirarmos o polímero da solução, obtivemos uma fibra. Existem outros polímeros, como por exemplo o nylon cujas fibras são muito utilizadas em tecidos. Estes são polímeros sintéticos, existem também fibras poliméricas naturais, como a lã, o algodão e a seda.

#### Bibliografia

[1] Adaptado de "*Cool Chemistry Concoctions: 50 Formulas that Fizz, Foam, Splatter and Ooze*" por Joe Rhatigan e Veronika Alice Gunter (Asheville, NC: Lark Books, 2007).

[2] Adaptado de "*Plastics and Polymer Science Fair Projects - Using Hair Gel, Soda Bottles, and Slimy stuff*" por Madeline Goodstein (USA, Enslow Publishers, Inc 2004).





### 3.º Encontro Nacional de Química Terapêutica 28 - 30 novembro 2012 em Aveiro

O 3.º Encontro Nacional de Química Terapêutica irá decorrer na Universidade de Aveiro, de 28 a 30 de novembro de 2012. Este encontro bianual, organizado pelo grupo de Química Terapêutica da SPQ, pretende ser uma plataforma para discussão das descobertas e desenvolvimentos mais recentes na área da Química Terapêutica, com especial realce para as suas ligações interdisciplinares com a Química, Bioquímica, Biologia e Medicina. Este encontro é uma excelente oportunidade para troca de conhecimentos entre investigadores das várias áreas com ligação à Química Medicinal. Tal como aconteceu nos encontros anteriores (Porto – 2008; Coimbra – 2010), encoraja-se, em particular, os jovens investigadores a participar e a apresentar o seu trabalho neste encontro que será internacional, uma vez que incluirá, no último dia, o 1.º Encontro Luso-Espano-Brasileiro de Química Medicinal. Esta iniciativa tem como objetivo gerar um encontro envolvendo os colegas espanhóis e brasileiros e, se for bem sucedido, ser alargado a outros países da América do Sul.

O encontro consistirá em 10 comunicações plenárias, 7 comunicações convidadas, 12 comunicações orais e três sessões de posters. As comunicações orais serão escolhidas essencialmente a partir dos resumos enviados pelos participantes.

O 3.º Encontro Nacional de Química Terapêutica irá ter um congresso satélite, que se realizará também na Universidade de Aveiro, de 25 a 27 de novembro de 2012, sobre “Natural Products and Related Redox Catalysts: Basic Research and Applications”. Os interessados terão que se inscrever, mas a inscrição é gratuita.

E: [dq-3enqt@ua.pt](mailto:dq-3enqt@ua.pt)  
URL: <http://3enqt.web.ua.pt>



### Ourense Conference on Imaging Mass Spectrometry 3 – 5 setembro 2012 em Ourense, Espanha

A Conferência *OurCon: Ourense Conference on Imaging Mass Spectrometry* realiza-se em Espanha, entre 3 e 5 de setembro de 2012, sendo organizada com o apoio da Ação COST BM1104: “Mass Spectrometry Imaging: New Tools for Healthcare Research”. No dia imediatamente anterior ao início do evento (tarde do dia 2 de setembro), decorrerá um curso de formação pré-congresso, o qual será gratuito, mas limitado ao número de vagas disponíveis. Para inscrições no curso ou para mais informações, deverá contactar o Dr. J. L. Capelo (e-mail: [jlcapelom@uvigo.es](mailto:jlcapelom@uvigo.es)).

Os tópicos principais incluídos na conferência são, entre outros: Preparação de tecidos; Instrumentação e como tirar o maior proveito das ferramentas disponíveis; Quantificação e normalização da resposta; Análise de dados: transformar dados em conhecimento; Descoberta de biomarcadores e respetiva validação; Histologia molecular

baseada em MS; Análise de fármacos e pequenas moléculas; Novas aplicações e tecnologias.

Mais informações sobre o evento encontram-se disponibilizadas na página web do mesmo.

E: [proteomass@proteomass.org](mailto:proteomass@proteomass.org)

URL: <http://www.ourcon.es>



### XXVI International Carbohydrate Symposium 22 - 27 julho 2012 em Madrid, Espanha

O 26.º Simpósio Internacional de Hidratos de Carbono (ICS2012) irá decorrer no Hotel Meliá Castilla, localizado no centro de Madrid, entre os dias 22 e 27 de julho de 2012. Este simpósio, realizado bianualmente desde 1960 sob os auspícios da Organização Internacional de Carbohidratos (ICO), é considerado como um dos eventos mais importantes na área da química e bioquímica dos glúcidos.

O simpósio reunirá investigadores com interesse na área, pretendendo cobrir todos os aspetos das glicociências modernas, incluindo investigação fundamental e aplicada. Durante o simpósio serão atribuídos 3 prémios Wiley-VCH a jovens investigadores que tenham apresentado o seu trabalho na forma de poster ou de comunicações orais breves e ainda 3 prémios atribuídos pela Lilly, no valor de 200€ cada, às melhores comunicações orais proferidas por jovens investigadores.

Informações detalhadas sobre este evento podem ser consultadas na respetiva página web.

E: [jjbarbero@cib.csic.es](mailto:jjbarbero@cib.csic.es)

URL: <http://www.ics2012madrid.com/index.html>



### 9th International Symposium on Biomolecular Chemistry 25 - 29 agosto 2012 em Pequim, China

O nono Simpósio Internacional da IUPAC em Química Biomolecular (ISBOC-9) irá decorrer juntamente com o 8th International Symposium for Chinese Medicinal Chemists (ISCMC2012) entre 24 e 29 de agosto de 2012 em Pequim. O simpósio ISBOC-9 é patrocinado pela Divisão de Química Biomolecular da IUPAC e tem como principal objetivo incrementar a comunicação académica entre investigadores de todo o globo e promover o desenvolvimento desta área de investigação. Pela primeira vez o ISBOC será organizado na China.

Estudiosos ilustres de todo o mundo serão convidados para proferir apresentações keynote com especial enfoque para a vanguarda e os progressos levados a cabo na investigação, desenvolvimento e descoberta de novos fármacos. Refira-se, em particular, a presença dos laureados com o prémio Nobel, Prof. Robert Huber (Max Planck Institute of Biochemistry, Alemanha), que apresentará a sessão plenária “Intracellular proteolysis, mechanisms, structures and drug development” e a Prof. Ada E. Yonath (Weizmann Institute of Science, Israel), que apresentará

a sessão plenária “Can structures lead to improved antibiotics?”. Acrescente-se ainda que irá estar presente um grupo de investigadores da American Chemistry Society (ACS) que organizará dois workshops sobre “hot spots” na investigação e desenvolvimento de novos fármacos.

E: [liangren@bjmu.edu.cn](mailto:liangren@bjmu.edu.cn)

URL: <http://isboc9.dconference.cn/dct/page/1>



7<sup>th</sup> World Mycotoxin Forum and XIII International IUPAC Symposium on Mycotoxins & Phycotoxins  
5 – 9 novembro 2012 em Roterdão, Holanda

Após o sucesso de edições anteriores, o 7.º Fórum Mundial em Micotoxinas (WMF) irá decorrer em simultâneo com o XXIII Simpósio Internacional da IUPAC em Micotoxinas e Ficotoxinas. O “*WMF meets IUPAC*” terá lugar em Roterdão, na Holanda, entre 5 e 9 de novembro de 2012 e será um evento único pela sua organização conjunta. O objetivo do “*WMF meets IUPAC*” é sobretudo sensibilizar e alertar para os riscos relativos à saúde humana e animal devido à contaminação tóxica natural em matérias-primas agrícolas e frutos do mar, e de potenciais opções de gestão de risco, tecnologias e estratégias para a minimização dessa contaminação. O evento incidirá em especial sobre micotoxinas, ficotoxinas e toxinas de plantas. O evento pretende ser uma plataforma única para a indústria de alimentos e alimentação, autoridades reguladoras e da ciência (i) permitindo a troca de informações, (ii) promovendo a harmonização da legislação de segurança alimentar, bem como de procedimentos de controlo, (iii) fazendo recomendações de estratégias para incrementar a prevenção e controlo das contaminações, (iv) assegurando a segurança e salubridade da alimentação humana e animal. Sessões plenárias de elevada qualidade, tempo amplo para discussões, e todas as oportunidades para estabelecer contatos gratificantes, são aspetos que a conferência “*WMF meets IUPAC*” pretende proporcionar. E o evento também promete um interessante programa social em Roterdão!

E: [hans.vanegmond@wur.nl](mailto:hans.vanegmond@wur.nl)

URL: <http://www.wmfmeetsiupac.org>



Chemical Reactions on Food VII  
14 - 16 novembro 2012 em Praga, República Checa

A 7.ª Conferência Internacional de Reações Químicas em Alimentos (CRF-2012) irá decorrer em Praga entre os dias 14 a 16 de novembro de 2012. Esta conferência é organizada pelo *Institute of Chemical Technology* em conjunto com o *Food Research Institute Prague*, com o apoio da European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS). Em linha com os eventos anteriores, o tema principal do evento será “Novos conhecimentos sobre as reações químicas durante o processamento e armazenamento de alimentos”. Os tópicos principais a serem

abordados serão: Compostos associados com a qualidade nutricional e sensorial dos alimentos; Constituintes biologicamente ativos nos alimentos e matérias primas; Estratégias para melhorar a qualidade e segurança alimentar; Química e desenvolvimento de alimentos inovadores. Para a obtenção de mais informações, consultar a página web do evento.

E: [CRF2012@vscht.cz](mailto:CRF2012@vscht.cz)

URL: <http://www.crf2012.eu>



XVIII Encontro Luso-Galego de Química  
28 – 30 novembro 2012 em Vila Real

O XVIII Encontro Luso-Galego de Química terá lugar nos dias 28, 29 e 30 de novembro de 2012, na Aula Magna da UTAD - Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, em Vila Real. Uma vez mais, e como fruto da estreita relação existente entre a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), o Colégio Oficial de Químicos (COLQUIGA) e a Associação dos Químicos da Galiza (AQUIGA), será dada continuidade aos Encontros Luso-Galegos de Química. Os Encontros Luso-Galegos de Química têm por objetivo o intercâmbio científico e tecnológico entre Portugal e a Galiza e têm a particularidade de ser especialmente dedicado aos investigadores mais jovens (estudantes de graduação, pós-graduação e recém-doutorados), pois é composto por um número elevado de apresentações orais. Precisamente, para o idioma não constituir uma barreira, as línguas oficiais são o português, o galego e o espanhol, embora sejam também aceites trabalhos em inglês. O encontro manterá a sua estrutura habitual, 5 sessões plenárias sobre temas da atualidade, apresentadas por cientistas de prestígio, e algumas sessões paralelas para as restantes contribuições: orais (com duração de 10-15 minutos) e em forma de painel; permitindo, em ambos os casos, facilitar o intercâmbio científico e tecnológico entre os presentes, mantendo como objetivo a realização de um encontro com elevada qualidade científica. As áreas científicas do Encontro são as seguintes: Química Fundamental (Química Analítica, Química-Física, Química Inorgânica e Química Orgânica), Química Industrial e Tecnologia Química (Engenharia Química e Processos Industriais), Química Agro-Mar-Alimentar, Química Ambiental, Bioquímica e Biotecnologia, Nanoquímica e Nanotecnologia, Química e Saúde (Química Medicinal, Toxicologia, Análises Clínicas, Genómica e Química Forense), Química e Energia e Educação e Ensino da Química. Haverá ainda lugar à realização de um Mini-Simpósio em Líquidos Iónicos. Os resumos devem ser escritos numa das línguas oficiais do Encontro ou em inglês e devem ser submetidos eletronicamente no portal do Encontro até 22 de outubro de 2012, após registo, indicando a modalidade de apresentação pretendida (oral ou painel), bem como a área científica respetiva. O modelo para resumo está disponível no portal do Encontro.

E: [lusogalego2012@utad.pt](mailto:lusogalego2012@utad.pt)

URL: [www.spq.pt/eventos/XVIIIILGQ](http://www.spq.pt/eventos/XVIIIILGQ)

Secção compilada por Joana Amaral  
([bquimica@ipb.pt](mailto:bquimica@ipb.pt)) [www.spq.pt](http://www.spq.pt)



# 11º Encontro de Química dos Alimentos

Qualidade  
dos alimentos:  
novos desafios

Bragança, 2012  
16-19 Setembro

[www.spq.pt/eventos/11eqa](http://www.spq.pt/eventos/11eqa)  
[eqa11@ipb.pt](mailto:eqa11@ipb.pt)



1911-2011  
**100 ANOS**



 **ipb**  
INSTITUTO POLITÉCNICO  
DE BRAGANÇA



Centro de  
Investigação  
de Montanha





## 1 – 6 julho 2012 em Munique, Alemanha

15th International Congress on Catalysis  
E: martz@dechema.de  
URL: <http://events.dechema.de/en/icc2012.html>

## 1 – 6 julho 2012 em Melbourne, Australia

19th International Conference on Organic Synthesis  
E: masr@unimelb.edu.au  
URL: <http://www.icos19.com>

## 4 – 6 julho 2012 em Poitiers, França

RICT 2012 - Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery and 48th International Conference on Medicinal Chemistry  
E: secretariat@ldorganisation.com  
URL: <http://www.rict2012.org>

## 9 – 12 julho 2012 em Istambul, Turquia

2nd International Conference in Chemistry for Cultural Heritage  
E: hadi.ozbal@chemch2012.org  
URL: <http://www.chemch2012.org>

## 15 – 20 julho 2012 em Coimbra

XXIV IUPAC Symposium on Photochemistry  
E: burrows@ci.uc.pt  
URL: <http://www.photoiupac2012.com>

## 15 – 20 julho 2012 em Roma, Itália

22nd International Conference on Chemistry Education - "Stimulating Reflection and Catalysing Change in Chemistry Education"  
E: luigi.campanella@uniroma1.it  
URL: <http://www.iccerice2012.org>

## 18 – 20 julho 2012 em Lisboa

6th Spanish Portuguese Japanese Organic Chemistry Symposium  
E: aprauter@fc.ul.pt  
URL: <http://www.spq.pt/eventos/6SPJOCS>

## 22 – 27 julho 2012 em Xining, China

2nd International Conference in Chemistry for Cultural Heritage  
E: dewen\_zeng@hotmail.com  
URL: <http://issp2012.csp.science.cn>

## 22 – 27 julho 2012 em Madrid, Espanha

XVI International Carbohydrate Symposium  
E: jjbarbero@cib.csic.es  
URL: <http://www.ics2012madrid.com/index.html>

## 5 – 10 agosto 2012 em Búzios, Brasil

22nd International Conference on Chemical Thermodynamics and 67th Calorimetry Conference  
E: wloh@iqm.unicamp.br  
URL: <http://www.icct2012.org>

## 5 – 11 agosto 2012 em Celtic Manor, País de Gales

EUCHEM Conference Molten Salts and Ionic Liquids  
E: euchem2012@qub.ac.uk  
URL: <http://www.euchem2012.org>

## 19 – 29 agosto 2012 em Mainz, Alemanha

24th International Liquid Crystal Conference  
E: pleiner@mpip-mainz.mpg.de  
URL: <http://www.ilcc2012.de>

## 25 – 29 agosto 2012 em Foz do Iguaçu, Brasil

4th International IUPAC Conference on Green Chemistry  
E: vaniaz@ufscar.br  
URL: <http://congresscentral.com.br/sbq/ufscar/icgc4/index.php>

## 25 – 29 agosto 2012 em Pequim, China

9th International Symposium on Biomolecular Chemistry  
E: liangren@bjmu.edu.cn  
URL: <http://isboc9.dconference.cn/dct/page/1>

## 26 – 30 agosto 2012 em Praga, República Checa

4th EuCheMS Chemistry Congress  
E: info@euchems-prague2012.cz  
URL: <http://www.euchems-prague2012.cz>

## 2 – 6 setembro 2012 em Berlim, Alemanha

22nd International Symposium on Medicinal Chemistry (EFMC-ISMC 2012)  
E: secretariat@ldorganisation.com  
URL: [http://www.ldorganisation.com/produits.php?langue=english&cle\\_menu=1238915417](http://www.ldorganisation.com/produits.php?langue=english&cle_menu=1238915417)

## 2 – 6 setembro 2012 em Oxford, Reino Unido

DrugDesign2012  
E: info@lpmhealthcare.com  
URL: <http://www.lpmhealthcare.com/Drugs2012/DrugsHome.htm>

## 3 – 5 setembro 2012 em Ourense, Espanha

Ourense Conference on Imaging Mass Spectrometry  
E: proteomass@proteomass.org  
URL: <http://www.ourcon.es>

## 9 – 13 setembro 2012 em Valencia, Espanha

40th International Conference on Coordination Chemistry (ICCC-40)  
E: eugenio.coronado@uv.es  
URL: <http://iccc40.com>

## 9 – 13 setembro 2012 em Durham, Reino Unido

21st IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC 21)  
E: events@rsc.org  
URL: <http://www.rsc.org/ConferencesAndEvents/RSCConferences/icpoc21/index.asp>

## 11 – 14 setembro 2012 em Kiev, Ucrânia

9th International Conference on Polymer-Solvent Complexes and Intercalates (PolySolvat-9)  
E: bulavin221@gmail.com  
URL: <http://www-ics.u-strasbg.fr/~polysolvat>

## 15 – 20 setembro 2012 em Moscovo, Rússia

International Conference on Catalysis in Organic Synthesis (ICCOS-2012)  
E: mpe@ioc.ac.ru  
URL: <http://www.ioc.ac.ru/iccos-2012>

## 16 – 19 setembro 2012 em Bragança

11.º Encontro de Química dos Alimentos (11.º EQA)  
E: eqa11@ipb.pt  
URL: <http://www.spq.pt/eventos/11eqa>

## 25 – 28 setembro 2012 em Aveiro

IV Ibero-American NMR Meeting/VI GERMN Bienal Meeting/III Iberian NMR Meeting  
E: iberoanmr2012@ua.pt  
URL: <http://www.spq.pt/eventos/iberoanmr2012>

## 5 – 9 novembro 2012 em Roterdão, Holanda

7th World Mycotoxin Forum and XIIIth International IUPAC Symposium on Mycotoxins & Phycotoxins  
E: hans.vanegmond@wur.nl  
URL: <http://www.wmfmeetsiupac.org>

## 28 – 30 novembro 2012 em Vila Real

XVIII Encontro Luso-Galego de Química  
E: lusogalego2012@utad.pt  
URL: [www.spq.pt/eventos/XVIIIILGQ](http://www.spq.pt/eventos/XVIIIILGQ)

## 28 – 30 novembro 2012 em Aveiro

3.º Encontro Nacional de Química Terapêutica  
E: dq-3enqt@ua.pt  
URL: <http://3enqt.web.ua.pt>