

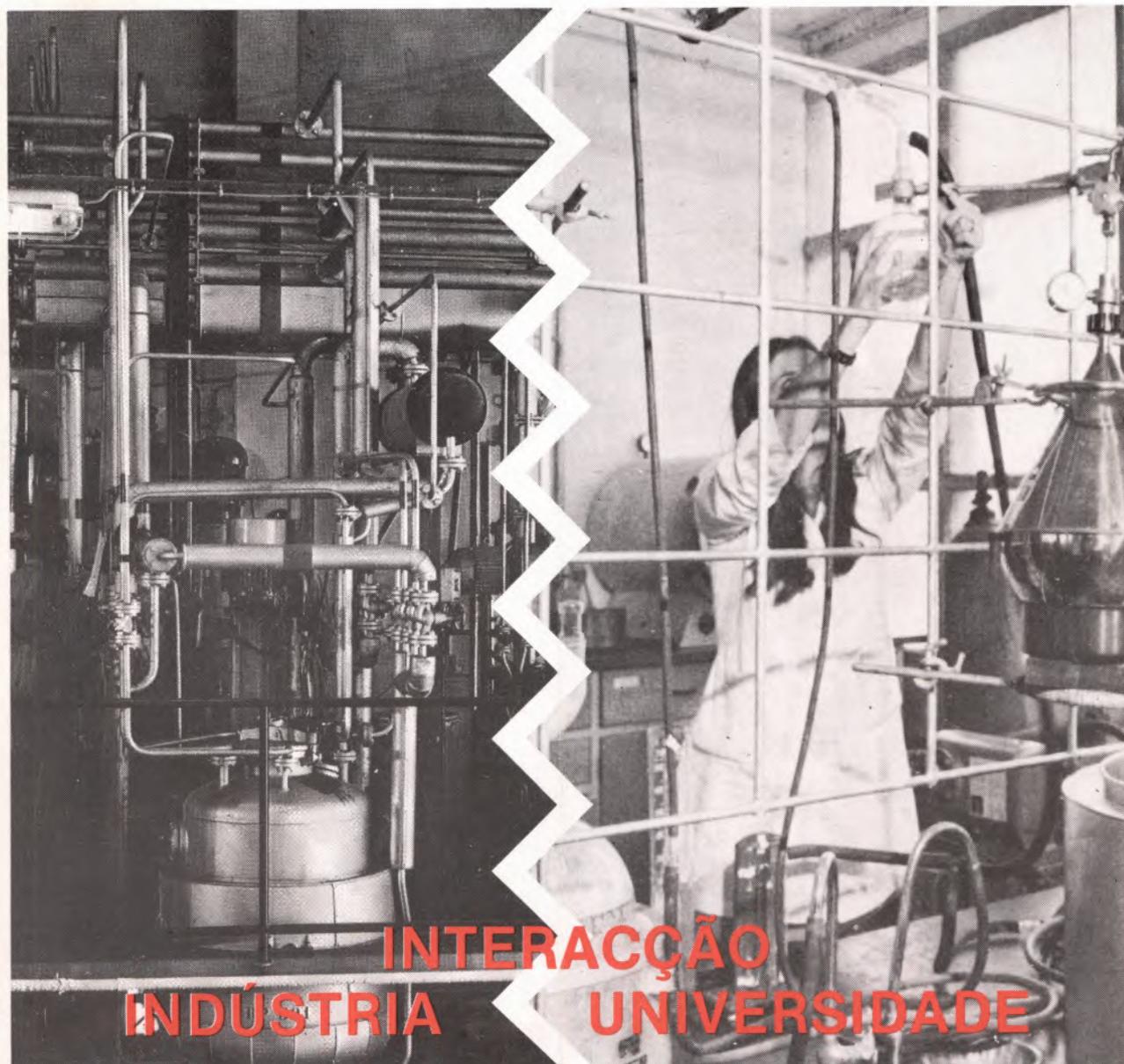
# boletim

SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE  
QUIMICA



Envelope para  
pagamento de quotas  
neste número

Ano 3-Série II n.º 3 • MARÇO 1980 • Director: A. M. LOBO



INDÚSTRIA INTERACÇÃO UNIVERSIDADE

Director da Publicidade:  
**Dr. José L.F.C. Lima**  
Faculdade de Ciências  
Departamento de Química  
4000 PORTO

**O arranjo gráfico da publicidade  
será da responsabilidade dos anun-  
ciantes.**

**Preços:**

<b>Uma página</b>	<b>—</b>	<b>10 000\$00</b>
<b>1/2 »</b>	<b>—</b>	<b>5 000\$00</b>
<b>1/4 »</b>	<b>—</b>	<b>2 500\$00</b>
<b>1/8 »</b>	<b>—</b>	<b>1 250\$00</b>

## **SUMÁRIO**

<b>Mensagem da Presidente da S.P.Q.</b>	<b>1</b>
<b>Líquidos: Um estado crítico .....</b>	<b>2</b>
<b>Interacção Universidade-Indústria</b>	<b>10</b>
<b>Ensino das Ciências nas escolas secundárias da Europa .....</b>	<b>11</b>
<b>Perspectivas de desenvolvimento da indústria química fina em Portugal.....</b>	<b>13</b>
<b>Conceito e medida de temperatura</b>	<b>27</b>
<b>Congressos e conferências no es- trangeiro .....</b>	<b>37</b>
<b>Conferência internacional sobre educação em química .....</b>	<b>40</b>
<b>Actividades da S.P.Q.....</b>	<b>43</b>
<b>Divisão de educação.....</b>	<b>45</b>
<b>Noticiário .....</b>	<b>48</b>
<b>Interface .....</b>	<b>50</b>
<b>Segurança .....</b>	<b>51</b>

**SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA**  
**BOLETIM DE INSCRIÇÃO DE SÓCIO COLECTIVO E DE PAGAMENTO**  
**DE QUOTA**

---

---

**A** A preencher, em maiúsculas, apenas por: (1) Novos Sócios; (2) Sócios que desejem actualização da sua ficha

1. Nome da entidade .....

.....

2. Morada .....

.....

3. Actividades a que se dedica .....

.....

.....

.....

.....

4. Deseja pertencer à Delegação de .....

---

---

**B** A preencher no acto de pagamento da quota (quota mínima anual: 5 000\$00)

Junto enviamos, em dinheiro/cheque/vale postal, a quantia de \_\_\_\_\_ \$\_\_\_\_\_, referente à nossa quota da Sociedade Portuguesa de Química no ano de 19\_\_\_\_\_

Vale postal n.º \_\_\_\_\_ Estação \_\_\_\_\_

Cheque n.º \_\_\_\_\_ Banco \_\_\_\_\_

---

---

\_\_\_\_\_, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 19\_\_\_\_\_

**Assinatura\*** \_\_\_\_\_

\* A assinatura deve ser autenticada com carimbo ou selo branco da Entidade.

**SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA**  
**BOLETIM DE INSCRIÇÃO DE SÓCIO COLECTIVO E DE PAGAMENTO**  
**DE QUOTA**

A Preencher, em maiúsculas, apenas por: (1) Novos sócios; (2) Sócios que desejem actualizar a sua ficha

1. Nome da entidade .....

2. Morada .....

3. Actividades a que se dedica .....

4. Deseja pertencer à Delegação de .....

B A preencher no acto de pagamento da quota (quota mínima anual: 5 000\$00)

Junto enviamos, em dinheiro/cheque/vale postal, a quantia de \_\_\_\_\_, referente à nossa quota da Sociedade Portuguesa de Química no ano de 19\_\_

Vale postal n.º \_\_\_\_\_ Estado \_\_\_\_\_

Cheque n.º \_\_\_\_\_ Banco \_\_\_\_\_

de \_\_\_\_\_ de 19\_\_

Assinatura\*

\* A assinatura deve ser autenticada com o carimbo da entidade.

# SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

## BOLETIM DE INSCRIÇÃO DE SÓCIO E DE PAGAMENTO DE QUOTA

A A preencher, em maiúsculas, apenas por: (1) Novos Sócios; (2) Sócios que desejem actualização da sua ficha\*

1. Nome .....

2. Data e local de nascimento .....

3. Morada .....

4. Graus Académicos .....

5. Endereço Profissional .....

6. Interesses Profissionais .....

7. Cargos que desempenha .....

8. É sócio da Sociedade Portuguesa de Física?

Sim

Não

9. Deseja fazer parte da S.P.Q. na qualidade de sócio

Efectivo

Estudante

10. Deseja pertencer à Delegação de .....

11. Deseja pertencer à Divisão/às Divisões de .....

**Sócios Proponentes**

**Nome**

**Assinatura**

- 1) \_\_\_\_\_
- 2) \_\_\_\_\_

**B A preencher apenas quando haja alterações a fazer**

1. Desejo mudar a minha inscrição para a Delegação de .....
2. Desejo passar a pertencer à Divisão/às Divisões de .....
3. Desejo anular a minha inscrição na Divisão/nas Divisões de .....
- 4.\*\*Desejo passar a ser sócio efectivo da S.P.Q.

**C A preencher no acto de pagamento da quota (quota mínima anual: 300\$00)**

**estudantes: 150\$00**

Junto envio, em dinheiro/cheque/vale postal, a quantia de \_\_\_\_\_ \$ \_\_\_\_\_, referente à minha quota da Sociedade Portuguesa de Química no ano de 19.....

Vale postal n.º \_\_\_\_\_ Estação \_\_\_\_\_

Cheque n.º \_\_\_\_\_ Banco \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 19\_\_\_\_\_

**Assinatura** \_\_\_\_\_

\* Neste segundo caso apenas podem interessar os pontos 1, 3, 4, 5, 6, 7 e 8.

\*\* Apenas diz respeito a Sócios Estudantes.

# boletim

SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE  
QUÍMICA



## DIRECÇÃO DA S.P.Q.

Presidente — **M. Alzira Amoster Ferreira**  
Vice-Presidente — **Manuel A. V. Ribeiro da Silva**  
Secretário Geral — **A. Romão Dias**  
Secretário Geral Adjunto — **M. Nunes da Ponte**  
Tesoureiro — **Francisco Pedroso**  
Secretário Adjunto — **M. Cândida Vaz**

## Conselho Fiscal

Presidente — **César Viana**  
Vice-Presidente — **Luís Alcácer**  
Relator — **V. Meira Soares**

## Mesa da Assembleia Geral

Presidente — **B. Herold**  
1.º Secretário — **Alberto Amaral**  
2.º Secretário — **Teixeira Dias**

## Assembleias Regionais

### DELEGADO DO NORTE (Sede no Porto)

#### Assembleia Regional

Presidente — **João Luís Cabreira de Oliveira Cabral**  
1.º Secretário — **José Luis C. Conceição Figueiredo**  
2.º Secretário — **Rui Adelino Torcato Barroca**

#### Direcção da Delegação Regional

Presidente — **Manuel Anibal V. Ribeiro da Silva**  
Secretário — **José Alberto Nunes Ferreira Gomes**  
Vogal — **José Luís Fontes da Costa Lima**

### DELEGAÇÃO DO CENTRO (Sede em Coimbra)

#### Assembleia Regional

Presidente — **António J. Campos Varandas**  
1.º Secretário — **Júlio António Marques da Cunha Pinto**  
2.º Secretário — **Maria Helena Ferreira Teixeira**

#### Direcção da Delegação Regional

Presidente — **António José Ferrer Correia**  
Secretário — **Maria da Conceição Pedroso Lima**  
Vogal — **Maria Isabel Almeida Ferra**

### DELEGAÇÃO DO SUL (Sede em Lisboa)

#### Assembleia Regional

Presidente — **José Luís Cardoso Pereira**  
1.º Secretário — **José Dias Lopes da Silva**  
2.º Secretário — **Carlos José Rodrigues Crispim Romão**

#### Direcção da Delegação Regional

Presidente — **Maria Alzira Almoster Ferreira**  
Secretário — **José Miguel da Costa Reis**  
Vogal — **Maria Isabel da Silva Martinho Simões**

Execução gráfica — Proença, Coop. de Artes Gráficas, SCARL. Tel. 869249

## Mensagem da Presidente da S.P.Q.



**M. Alzira Almoster  
Ferreira**  
Presidente da S.P.Q.

Mais um ano se inicia na vida da Sociedade Portuguesa de Química que esperamos constitua um novo avanço no esforço de renovação e desenvolvimento das suas potencialidades.

Participar na vida da S.P.Q. como membro dos seus corpos directivos tem constituído uma oportunidade excepcional para, em conjunto com outros, meditar sobre as relações entre a química e as actividades dos químicos e os anseios e receios da humanidade.

A variedade de assuntos que dizem respeito à química e a relevância dos mesmos nas necessidades económicas e humanas actuais são significativas da importância da química como ciência, e das suas aplicações. Muito poderá fazer-se através dos progressos da química, para ajudar a resolver problemas de energia, recursos naturais, agricultura, saúde e tantos outros de menor vulto mas nem por isso menos importantes. Compete-nos, por isso, procurar os meios mais eficazes de fazer avançar e utilizar os nossos conhecimentos em química e promover o seu intercâmbio internacional, do que poderá resultar uma mais rápida melhoria da condição humana.

Uma conclusão consoladora a que facilmente se chega é que as pessoas não são intrinsecamente contra a ciência ou a tecnologia. O que as preocupa é como e quem decide nesses domínios, desejando, naturalmente, que não sejam postos em causa o futuro e o bem estar da humanidade.

Os químicos podem e devem estar envolvidos em numerosas decisões a tomar, quer como cientistas, quer como simples cidadãos que todos são.

Como cientistas, alguns estarão empenhados na expansão do conhecimento científico, outros no desenvolvimento de novas opções tecnológicas, outros ainda em fazer compreender a necessidade e oportunidade dessas mesmas opções. Todos, como cidadãos, têm obrigação de informar, e talvez influenciar, a opinião pública no âmbito que têm o privilégio de melhor conhecer.

Atravessamos uma época de profundas transformações em que um papel importante está reservado a todos os que profissionalmente estão envolvidos na ciência e na tecnologia. Que cada um de nós contribua com a sua quota parte, seja ela maior ou menor, em espírito de cooperação construtiva.

# LÍQUIDOS: UM ESTADO CRÍTICO



Jorge C. G. Calado  
Departamento de Química-Física  
Instituto Superior Técnico  
1000 Lisboa

*Aos meus professores de Ciências Físico-químicas  
que há 25 anos despertaram em mim  
o gosto pela beleza da verdade científica*

## 1 — Introdução

O reconhecimento da existência de três estados da matéria distintos — sólido, líquido e gasoso — é tão velho como a nossa civilização. Os quatro elementos de Empedocles de Agrigento (séc. VA.C.) são uma manifestação dessa realidade: a terra é *sólida*, a água é *líquida* e o ar é *gasoso*; o quarto elemento, o fogo, é a energia que permite transformar um estado noutro. No entanto, a explicação (quantitativa) das propriedades dos vários estados da matéria é muito mais recente e encontra-se na memória das quatro últimas gerações. Foi preciso esperar pelo século XIX, com os trabalhos de Gay-Lussac, Regnault, Andrews e van der Waals, entre outros, para se entender o comportamento dos gases reais; e foi já em pleno século XX que Bragg, Laue, Einstein, Born, Frenkel imprimiram a sua marca indelével ao desenvolvimento das teorias dos sólidos e suas propriedades.

Nada disto sucedeu por acaso. O século XIX, que viu soçobrar o neo-classicismo e esfumar-se o movimento romântico, trouxe-nos o impressionismo, a dissolução da realidade em impressões evanescentes. Turner cobriu as suas telas de fumos, vapores e nevoeiros e Monet via as catedrais ou as Houses of Parliament como neblinas impressionadas. Ruskin ambicionava engarrifar nuvens como o pai, que negociava em vinhos, engarrafava xerez. Até a técnica pontilista de um Seurat parece ser a contrapartida da visão mecânica do estado gasoso, tal como nos é dada na teoria cinética ou na estatística de Boltzmann. Impressões fugidias, estados de alma, «chuveiro incessante de átomos inumeráveis», de que nos falava Virginia Woolf. Com o dobrar do século as impressões aglutinam-se e cristalizam em volumes. Na sequência de Cézanne, que nos ensinara a ver a realidade, incluindo a Natureza, em termos de formas simples como o cone, a esfera e o cubo, aparece o cubismo, as construções mecânicas de Léger. Na arte, tal como na ciência, a simplicidade do gás precede a do sólido.

Se o século XIX foi a era do estado gasoso, e o século XX a era do estado sólido, não parece que tenhamos de esperar pelo século XXI para ver resolvidos os problemas que entravam o desenvolvimento das teorias dos líquidos. Esta posição otimista foi resumida

pelo Professor Rowlinson ao afirmar, na sua *Liversidge Lecture* de 1978, que «até há cerca de dez anos era vulgar ler-se em livros e artigos de revisão que pouco se sabia acerca da estrutura e propriedades de líquidos. ...Esta situação mudou agora dramaticamente.»<sup>1</sup> Referindo-nos a problemas específicos de misturas de líquidos, nós próprios tivemos também ocasião de escrever recentemente: «É hoje geralmente aceite que os problemas referentes à mecânica estatística de misturas líquidas de moléculas simples estão resolvidos. ...É possível fazer predições bastante correctas das funções de excesso termodinâmicas de sistemas simples.»<sup>2</sup> Mesmo em 1973, ao fazer o ponto da situação da teoria de equilíbrio de misturas líquidas, o Dr. McDonald afirmava: «Não é exagero dizer que o problema do cálculo das propriedades termodinâmicas de misturas simples está agora amplamente resolvido.»<sup>3</sup>

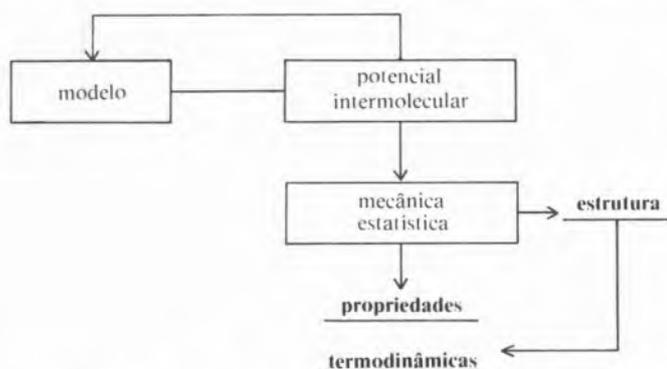
Mas justificar-se-á um tal grau de optimismo, ou encontram-se os líquidos num estado crítico de conhecimento, com avanço oscilante? E mesmo nos domínios em que tem sido possível fazer progressos notáveis não haverá coincidências fortuitas, com um «demonio» a jogar jogos de azar ou a fazer batota para nós ganharmos? Porque é que uma teoria relativamente rudimentar, como a chamada teoria de van der Waals na versão de um-fluido, produz resultados sensacionais, e uma versão mais depurada, mais próxima da realidade, como é a de dois-fluidos, não é mais do que um fracasso? São algumas destas contradições que vou desenvolver nesta lição, aproveitando ao mesmo tempo para apresentar alguns conceitos simples da mecânica estatística do estado líquido.

## 2 — Tipos de Fluidos

Conhece-se ou compreende-se uma substância quando é possível prever quantitativamente as suas propriedades. Idealmente deveria ser viável explicar em que condições há mudança de fase, mas devido à complexidade do problema, tradicionalmente os vários estados são estudados em separado. As teorias de que nos servimos para explicar as propriedades do gelo não são as mesmas a que recorreremos quando procuramos compreender os desvios à idealidade do vapor de água. No entanto, a substância é a mesma, e o conhecimento das característi-

cas individuais da molécula, bem como da energia de interacção entre moléculas, deve conter os vários estados em que macroscopicamente a substância se pode apresentar. Como diz Ulrich, o protagonista de *Der Mann ohne Eigenschaften* (O Homem sem Qualidades) de Robert Musil, «este arquétipo de todos os líquidos (a água não era, de modo algum, do ponto de vista físico, um líquido mas, consoante as circunstâncias, um corpo sólido, um líquido ou um gás. Em último lugar tudo se dissolvia num sistema de fórmulas que estavam de algum modo todas relacionadas umas com as outras.»<sup>4</sup>

A previsão das propriedades duma substância começa com o estabelecimento dum modelo para a molécula, continua com o postular dum determinado potencial intermolecular e culmina com a aplicação dos métodos da mecânica estatística ao conjunto macroscópico de moléculas, de acordo com o diagrama seguinte



Considerando, por exemplo, o metano  $\text{CH}_4$ , à partida temos de escolher um modelo para a molécula, isto é, se a tomamos como esférica dada a elevada simetria que a caracteriza, ou como constituída por um átomo de carbono e quatro de hidrogénio distribuídos segundo um tetraedro; temos de decidir ainda se as distâncias entre átomos são fixas ou se levamos em conta a vibração. Esta escolha vai, de certo modo, influenciar a selecção dum potencial intermolecular adequado. Na primeira hipótese, da molécula esférica, o potencial é do tipo esféricamente simétrico, isto é, apenas depende da distância que separa as moléculas,  $u(r)$ ; na segunda, é lógico tomar-se uma interacção átomo-a-átomo, isto é, a interacção entre duas moléculas de metano é o resultado da interacção entre o átomo de carbono duma e os átomos de hidrogénio da outra (C — H), entre os carbonos de cada uma (C — C), os hidrogénios das duas (H — H), etc. Podemos ainda tomar a molécula como pontual ou com dimensões, rígida ou macia, com cerne (núcleo) ou sem cerne. A força de interacção (intermolecular) é dada por

$$F(r) = - \frac{d u(r)}{dr} \quad (1)$$

Quanto às técnicas da mecânica estatística, são métodos aproximados de cálculo de integrais (nomeadamente do chamado integral configuracional que envolve o conhecimento do potencial intermolecular) ou de resolução de equações integrais. Não há soluções exactas para os problemas da termodinâmica estatística de líquidos reais. Em princípio aqueles métodos fornecem quer a estrutura (o modo como as moléculas se empacotam umas em torno das outras), quer as propriedades termodinâmicas de equilíbrio (ener-

gia, densidade, pressão, compressibilidade, capacidade calorífica, etc.) ou de transporte (viscosidade, condutibilidade térmica, coeficientes de difusão) que, evidentemente, dependem dessa estrutura. Ora, se é certo que se têm produzido progressos notáveis na idealização e refinamento das técnicas da mecânica estatística, principalmente graças à utilização de computadores rápidos, não é menos certo que não se passou ainda dos primórdios do conhecimento do potencial intermolecular. Dominado que foi o problema das forças intermoleculares das moléculas esféricas ou quase-esféricas, hoje as atenções concentram-se nas moléculas diatómicas como o azoto, o cloro, o monóxido de carbono. No entanto, para nenhuma destas espécies se conhece o potencial intermolecular com o pormenor com que é conhecido, por exemplo, para o argon (ou para o cripton, ou para o xénon). Estas são, aliás, as únicas substâncias cujas propriedades podem ser previstas com base num único potencial intermolecular, aplicável ao gás, ao líquido e ao sólido.

Os progressos conseguidos no estado líquido são essencialmente matemáticos, de métodos de cálculo, mas assentam em modelos grosseiros e versões ultra-simplificadas da energia potencial de interacção molecular.

Como disse o professor Andersen, «a relação entre a física dos líquidos e a matemática das nossas teorias está ainda muito pouco compreendida.»<sup>5</sup>

Qualquer que seja o potencial, ele deve conter uma parte repulsiva de curto alcance ou cerne (a repulsão electrónica é responsável pela impenetrabilidade da matéria) e uma parte de longo alcance, tendendo para zero com a distância, a que se chama cauda. A estrutura e as propriedades dos líquidos dependem das características destes dois componentes do potencial. Exemplo de potencial de longo alcance, com valores apreciáveis para distâncias grandes, é o coulombiano, gerado pelas cargas eléctricas

$$u(r) \propto \frac{1}{r} \quad \text{grande alcance} \quad (2)$$

O potencial gerado por um dipolo, que varia com  $r^{-3}$ , é de alcance médio, enquanto que os potenciais que dependem de potências de ordem superior são de curto alcance

$$u(r) \propto \frac{1}{r^6} \quad \text{curto alcance} \quad (3)$$

A ligação por ponte de hidrogénio é outro exemplo de interacção de curto alcance.

Um aspecto típico de potencial intermolecular é o indicado na figura 1. Tal potencial é caracterizado por, pelo menos, dois parâmetros — por exemplo, uma energia (a profundidade do fosso, —  $\epsilon$ ) e uma extensão (a distância finita de separação para a qual a energia de interacção é nula  $\sigma$ , que é uma medida da dimensão molecular). Um exemplo muito utilizado nos cálculos é o do potencial de Lennard-Jones, dado por

$$u(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (4)$$

Embora os pormenores do potencial real não possam ser definidos por uma curva biparamétrica, o conhecimento de  $\epsilon$  e  $\sigma$  dá-nos qualitativamente a essência do tipo de interacção.

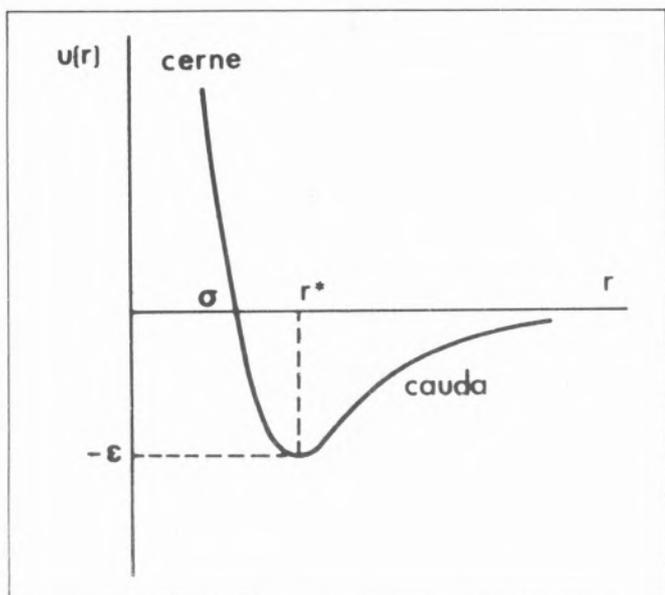


Fig. 1 — Potencial intermolecular

Para efeitos de classificação  $\epsilon$  é comparado com  $kT$  e  $\sigma^3$  com  $1/\rho$ , onde  $\rho$  é a densidade numérica (número de moléculas na unidade de volume)

$$\rho = \frac{N}{V} \quad (5)$$

$\rho\sigma^3 < 0.5$  caracteriza fluidos de densidade baixa, e  $\epsilon/kT < 1.5$  fluidos de interação fraca. Temos assim os seguintes tipos de fluidos na classificação de Andersen<sup>5</sup>.



### 3 — Fluidos Simples e a Ideia de van der Waals

Tal como referimos atrás, os progressos conseguidos no estado líquido resumem-se ao estudo de líquidos simples, e mesmo assim utilizando formas grosseiras de potencial. Por moléculas simples entendem-se aquelas que interagem segundo um potencial que é esféricamente simétrico e que não carecem de correcções quânticas. Trata-se, necessariamente, de moléculas pequenas em que os efeitos de estrutura são desprezáveis ou são arredondados. Os efeitos quânticos tornam-se importantes para moléculas pequenas e leves e de fraca interação, e são medidos pelo parâmetro  $\Lambda$

$$\Lambda = \frac{h}{\sigma\sqrt{m\epsilon}} \quad (6)$$

Admite-se ainda, em geral, aditividade dos potenciais intermoleculares, isto é, a energia potencial de interação total  $\Phi$  é a soma das energias correspondentes a todos os pares possíveis

$$\Phi = \sum_{i < j} u_{ij} \quad (7)$$

Na tabela 1 apresenta-se a lista de moléculas simples (hélio, néon, hidrogénio não estão incluídos devido às complicações quânticas).

Tabela 1. Moléculas Simples

esféricas	Ar, Kr, Xe
quase-esféricas	CH <sub>4</sub> , CF <sub>4</sub> , SF <sub>6</sub>
diatómicas	N <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , F <sub>2</sub> , Cl <sub>2</sub> , Br <sub>2</sub>
polares	CO, NO, HCl, HBr
poliatômicas	CO <sub>2</sub> , CS <sub>2</sub>
hidrocarbonetos	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>

Na classificação de Andersen tais substâncias caracterizam-se por apresentar densidade elevada, interação de curto ou médio alcance com cauda fraca e originam, em geral, diagramas de equilíbrio simples, do tipo representado nas figuras 2 e 3.

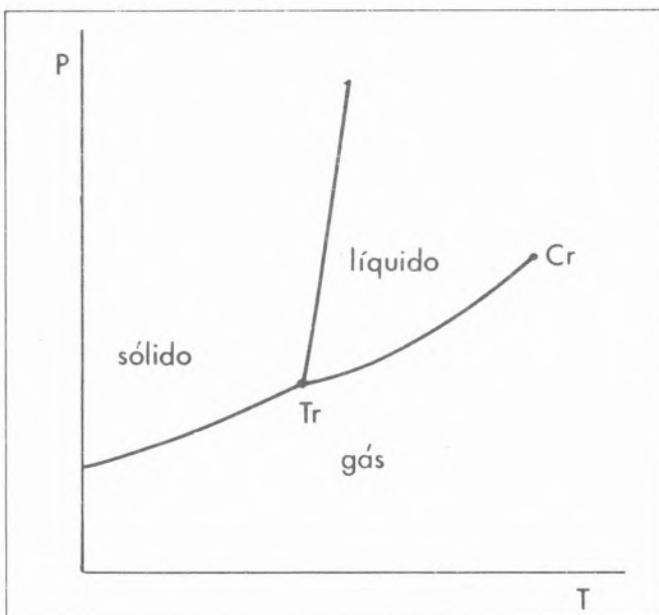


Fig. 2 — Diagrama de fases (p,T) para substâncias simples. Tr, ponto triplo; Cr, ponto crítico

O que permitiu o extraordinário avanço da física dos líquidos simples nesta década de setenta foi o renascimento da ideia, que vem de van der Waals, de que é a parte 'dura' do potencial repulsivo que determina a estrutura do líquido. Em linguagem corrente, a parte 'dura' do potencial (isto é, aquela que varia muito rapidamente com a distância) anda associada aquilo a que se chama a forma da molécula (o tamanho desta é uma consequência das forças repulsivas), de modo que a ideia de van der Waals também pode ser enunciada da seguinte maneira (Chandler): a forma das moléculas determina as correlações intermoleculares.<sup>6</sup>

Deve notar-se, no entanto, que este conceito apenas se aplica a líquidos de densidades elevadas, isto é, em que  $\rho \geq 2\rho_c$  (onde  $\rho_c$  é a densidade numérica crítica; para termo de comparação observe-se que a densidade do líquido no ponto triplo é  $\sim 3\rho_c$ ) e em que a parte do potencial que varia acentuadamente com a distância é a repulsiva (vd. figura 1).

$$(r^* - \sigma)/r^* \leq 0.1 \quad (8)$$

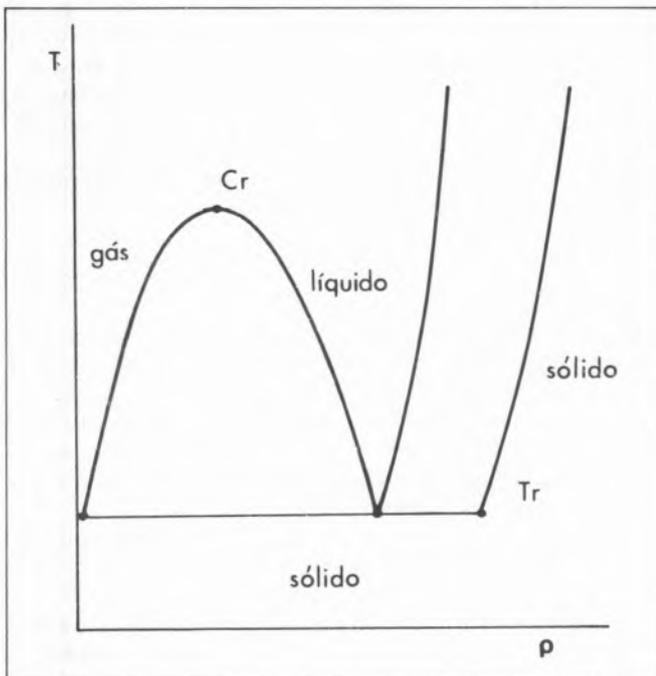


Fig. 3 — Diagrama de fases ( $T,p$ ) para substâncias simples

Estas restrições fazem com que a ideia de van der Waals não se aplique nem a gases (mesmo densos) nem a líquidos associados como a água, mas ela tem, mesmo assim, uma certa generalidade, cobrindo líquidos tão diferentes como o argon, o azoto, o tetracloreto de carbono, benzeno e mesmo líquidos fortemente polares não associados como o acetonitrilo  $\text{CH}_3\text{CN}$ .

A explicação da ideia de van der Waals em termos correntes é simples; com efeito, nos estados densos as moléculas estão bastante próximas umas das outras, com distâncias de separação médias da ordem de  $r^*$  ( $\rho^{-1/3} \leq r^*$ ) e qualquer pequena deslocação das moléculas causa

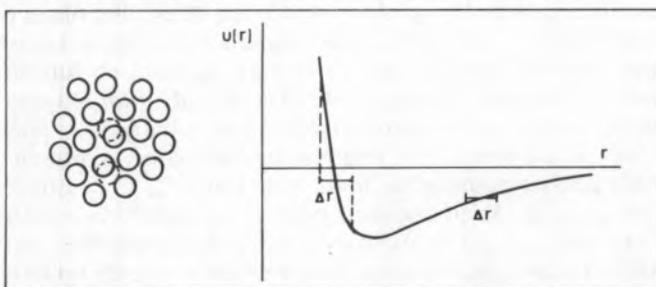


Fig. 4 — Variação da energia potencial repulsiva e atractiva com a mudança da distância de separação  $\Delta r$

grandes variações na energia potencial repulsiva, como se pode perceber pela figura 4. Pelo contrário, a parte atractiva do potencial intermolecular varia pouco com a distância, resultando daqui que as forças atractivas, nomeadamente as de natureza electrostática (interacções dipolo-dipolo, dipolo-quadrupolo, quadrupolo-quadrupolo) desempenham um papel menor na estrutura do líquido. O seu efeito primordial é criarem um campo médio ou potencial de fundo uniforme que mantém estável o estado de elevada densidade que é o líquido a pressões elevadas (tal como os núcleos são estáveis graças às forças nucleares, apesar da repulsão electrostática dos prótons). Mas uma vez atingida a elevada densidade por obra da 'cola invisível' que são as forças atractivas, a maneira como as moléculas se distribuem umas em torno

das outras, o seu empacotamento, é determinada pelas forças repulsivas (forma e tamanho). É esta a base da teoria de Weeks, Chandler e Andersen<sup>7</sup> (abreviadamente WCA) desenvolvida a partir de 1980. Segundo estas ideias a estrutura do argon líquido é semelhante à das bolas de pingue pongue numa caixa, tal como a do anidrido carbónico líquido se assemelha à dos pregos numa lata e a do benzeno à dos 'corn-flakes' numa tijela (admitindo que os 'corn-flakes' têm forma hexagonal plana). Isto acontece porque todas estas moléculas podem ser razoavelmente representadas por corpos rígidos de dimensão . no entanto, para o bromo parece já não ser assim: Hsu, Chandler e Lowden mostraram que a relativamente grande separação de cargas na molécula, responsável pelo elevado momento quadrupolar, produz interacções repulsivas específicas de curto alcance que impedem as moléculas de se aproximarem tanto quanto seria de esperar dada a sua constituição.<sup>8</sup> Outra excepção são os líquidos associados com o cloreto de hidrogénio HCl, em que a estrutura é determinada por forças atractivas de curto alcance (pontes de hidrogénio). Igualmente os sais fundidos, em que existem fortes forças atractivas entre os iões que variam rapidamente com a distância, não podem ser tratados pelo modelo de van der Waals.

Quando se fala de corpos rígidos há, evidentemente, uma aproximação: as moléculas são mais ou menos duras mas não são infinitamente rígidas, e na prática o que se faz é substituir  $\sigma$  pelo diâmetro da esfera rígida equivalente  $d$ , com  $d \sim 1.02 \sigma$ , como se indica na figura 5.

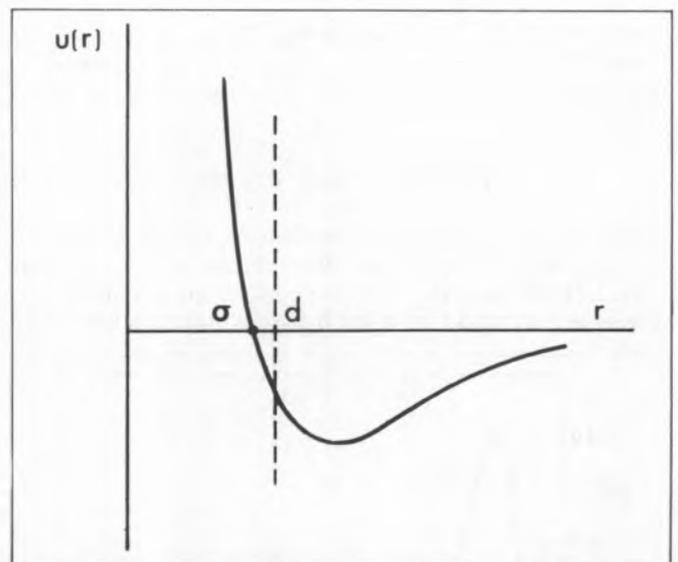


Fig. 5 — Potencial real e diâmetro da esfera rígida equivalente,  $d$ .

A extraordinária importância do modelo das esferas rígidas (que vem de van der Waals) no desenvolvimento da física dos líquidos revelou-se, em toda a sua beleza, com a descoberta de que um fluido de esferas rígidas (e também um fluido de discos rígidos, mas não um fluido de segmentos rígidos) pode solidificar, o que mostra que o fenómeno da fusão-solidificação é uma consequência da parte repulsiva do potencial. Este resultado foi obtido por técnicas computacionais modernas, nomeadamente os métodos de Monte-Carlo e de Dinâmica Molecular<sup>9,10</sup>, e na figura 6 mostra-se o gráfico obtido por Hoover e Ree para esferas rígidas<sup>11</sup>, com o patamar característico da mudança de estado (pressão constante).

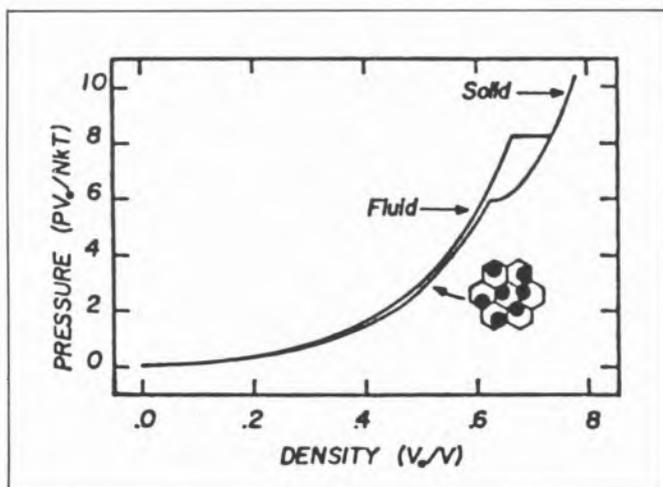


Fig. 6 — Equação de estado para sistema de esferas rígidas, obtida por cálculos de Monte-Carlo (Ref. 11)

Esta figura é reproduzida, com autorização, de *Journal of Chemical Physics*, Volume 48, pág. 3614. © 1968 by American Institute of Physics

#### 4. Estrutura e Propriedades Termodinâmicas

A estrutura dum estado condensado é um conceito intuitivo, mas é também passível duma descrição quantitativa. Se se tratar dum estado isotrópico, a probabilidade  $\Pi(1)$  de se encontrar uma molécula no elemento de volume  $d\tau$  em torno do ponto  $(x, y, z)$  é proporcional a  $d\tau$  e dada por

$$\Pi(1) = \frac{N}{V} d\tau = \rho d\tau \quad (9)$$

onde  $\rho$  é a densidade numérica. De modo análogo a probabilidade  $\Pi(1,2)$  de se encontrarem moléculas simultaneamente em dois pontos à distância  $r$  um do outro é dada por

$$\Pi(1,2) = \rho^2 g(r) d\tau_1 d\tau_2 \quad (10)$$

onde  $g(r)$  é a *função de distribuição radial*. Podem-se ainda definir funções de distribuição de 3.<sup>a</sup> ordem

$\Pi(1,2,3)$  envolvendo três moléculas, etc., mas o seu interesse é reduzido uma vez que se admite a aditividade

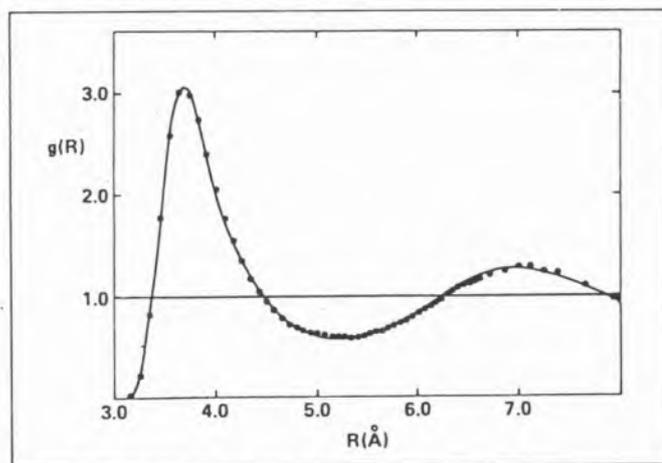


Fig. 7 — Função de distribuição radial  $g(r)$  do argon líquido a 85 K. Curva experimental, obtida por difracção de neutrões, e pontos calculados pelo método de Monte-Carlo (Ref. 10)

Esta figura é reproduzida, com autorização, de *Reviews of Modern Physics*, Volume 48, pág. 590 © 1976 by American Physical Society

dos potenciais intermoleculares ( $\epsilon$ ),  $g(r)$ , que para líquidos simples tem o aspecto representado na figura 7,

constitui uma descrição matemática da estrutura do fluido, isto é, é uma medida quantitativa dessa estrutura. A existência de picos pronunciados para distâncias curtas dá conta da ordem de curto alcance que caracteriza o líquido, ordem que se perde para longas distâncias, quando  $g(r)$  tende para o valor unidade. A função de distribuição radial mede também a densidade local em relação à densidade média, isto é

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho} \quad (11)$$

$g(r)$  não depende apenas da distância  $r$ ; é também uma função da temperatura e, mais acentuadamente, da densidade. Está ainda intimamente ligada à forma do potencial intermolecular —  $g(r)$  anula-se para a distância mínima de aproximação, e a maneira como cresce com  $r$  depende da dureza do cerne;  $g(r)$  depende ainda da intensidade e alcance da cauda do potencial.

A função de distribuição radial representada na figura 7 é um exemplo típico de  $g(r)$  para um meio isotrópico, como é o caso de líquidos feitos de moléculas esféricas. No entanto,  $g(r)$  é também função da anisotropia do potencial, e um exemplo simples ajudará a esclarecer este ponto. Consideremos o caso do tetracloreto de carbono,  $\text{CCl}_4$ . À temperatura ambiente e à pressão atmosférica a sua densidade é 1.595, a que corresponde um volume molar de  $96.5 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ . Isto significa que o volume ocupado por molécula é cerca de  $160 \text{ \AA}^3$ , o que dá cerca de  $5.4 \text{ \AA}$  para a 'espessura' duma molécula no estado líquido. No entanto, recorrendo aos valores dos raios covalentes dos átomos de carbono e cloro chega-se à conclusão que a corpolência duma molécula de  $\text{CCl}_4$  deve ser da ordem de  $7 \text{ \AA}$ , de modo que o resultado anterior significa que no estado líquido há interpenetração das moléculas. Por outras palavras, o modelo das esferas rígidas não é aplicável ao tetracloreto de carbono (como não será aplicável ao metano), sendo necessário um esquema mais sofisticado que dê efectivamente conta da forma desta molécula. A escolha óbvia é o tetraedro, e isto introduz imediatamente anisotropia no potencial intermolecular, e portanto também na função de distribuição. A função de distribuição *total* é agora uma função não só duma distância de separação  $r$ , mas também da orientação relativa das moléculas, representada pelos conjuntos de ângulos de Euler,  $\omega_1, \omega_2$ , isto é,  $g(r, \omega_1, \omega_2)$ . Analogamente para o potencial intermolecular  $u(r, \omega_1, \omega_2)$ . O método clássico de tratamento consiste em desenvolver estas funções numa série de polinómios ortogonais. Por exemplo, para moléculas diatómicas a orientação relativa é determinada por três ângulos  $\theta_i, \theta_j$  e  $\phi_{ij} = \phi_j - \phi_i$ , de modo que

$$g(r, \theta_i, \theta_j, \phi_{ij}) = 4\pi \sum_{\ell \ell' m} g_{\ell \ell' m}(r) Y_{\ell m}(\theta_i, \phi_i) Y_{\ell' -m}(\theta_j, \phi_j)$$

onde os  $Y$  são as harmónicas esféricas; todavia esta série tem o inconveniente de ser lentamente convergente para distâncias curtas, precisamente a zona em que a influência da orientação (anisotropia) deve ser mais forte. Outras dificuldades prendem-se com a noção de separação entre a parte repulsiva (cerne) e a parte atractiva (cauda) do potencial, e a assimilação da parte repulsiva com a forma efectiva da molécula, já que para moléculas poliatómicas o potencial global é uma função multidimensional da distância de separação e dos ângulos de Euler.

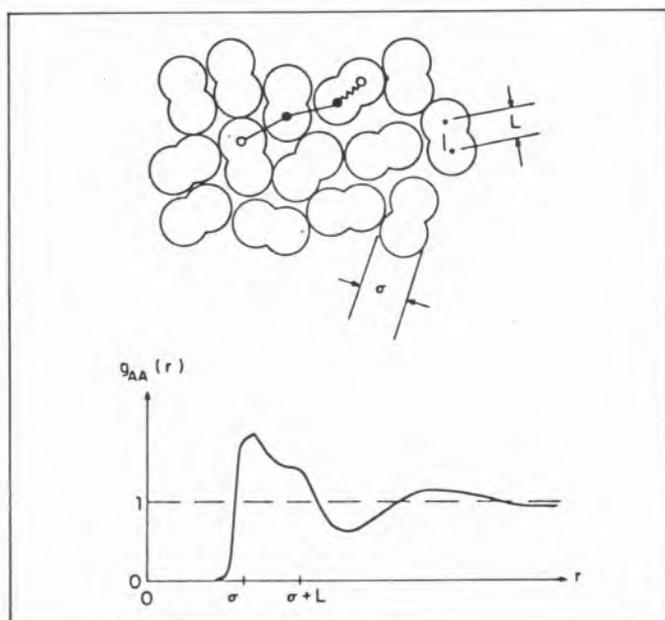


Fig. 8 — Função de distribuição radial átomo-a-átomo para um líquido de moléculas diatômicas  $A_2$  (Ref. 6)

Esta figura é reproduzida, com autorização, do *Annual Review of Physical Chemistry*, Volume 29. © 1978 by Annual Reviews Inc.

Uma alternativa consiste em construir funções de distribuição átomo-a-átomo ou funções de distribuição de sítios ("site distribution functions"), cujo significado se torna evidente com a ajuda da figura 8, que exemplifica o caso das moléculas diatômicas, compostas de esferas fundidas (diâmetro  $\sigma$  e elongação  $L$ ). Num estado denso como é o líquido, é provável que um átomo numa molécula esteja correlacionado com um átomo doutro, e a função de distribuição átomo-a-átomo  $g_{\alpha\alpha}(r)$  dá precisamente conta dessa correlação. O máximo de  $g_{\alpha\alpha}(r)$  para  $r \sim \sigma$  representa a distância de aproximação mais provável para átomos de moléculas diferentes (pico intermolecular), enquanto o cotovelo para  $r \sim \sigma + L$  resulta da presença inevitável do outro átomo da segunda molécula (pico intramolecular).

Chandler e os seus colaboradores usaram precisamente estas noções (coordenadas atômicas, funções de distribuição de sítios) para incorporar a estrutura molecular nos cálculos da mecânica estatística; desenvolveram assim um formalismo exacto, chamado "série em cachos de interacção de sítios" ("interaction site cluster series") onde os cachos derivam das sucessivas correlações de átomos inter e intramoleculares — dois a dois, três a três, etc. Este formalismo é passível de várias aproximações, uma delas a equação integral RISM (iniciais de "reference interaction site model") que permite calcular as funções de distribuição átomo-a-átomo  $g_{\alpha\beta}(r)$ . Um trabalho recente de Chandler, Hsu e Streett mostrou que a teoria RISM é, pelo menos, qualitativamente certa e está de acordo com os resultados obtidos com as simulações de Monte Carlo para moléculas diatômicas (homo e heteronucleares)<sup>12</sup>.

O conhecimento das funções de distribuição  $g_{\alpha\beta}(r)$  permite chegar aos factores de estrutura  $S(k)$ , que se podem obter experimentalmente através de técnicas de difracção (raios XX, neutrões).  $S(k)$ , onde.

$$k = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\theta \quad (13)$$

mede a intensidade de radiação difundida segundo um certo ângulo em relação à intensidade incidente, e, de facto,  $g(r)$  e  $S(k)$  são transformadas de Fourier uma da outra. Na figura 9 comparam-se os valores experimentais

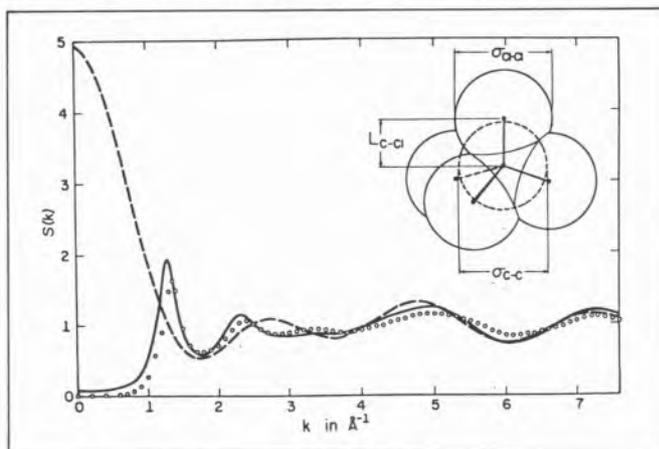


Fig. 9 — Factor de estrutura  $S(k)$  do tetracloreto de carbono líquido.  $\circ$ , resultados experimentais; —, solução RISM; ---, gás perfeito. (Ref. 13). Esta figura é reproduzida, com autorização, do *Journal of Chemical Physics*, Volume 61, pág. 5231. © 1974 by American Institute of Physics

obtidos para  $S(k)$  no caso do tetracloreto de carbono com a curva teórica obtida pelo RISM: a concordância é encorajadora<sup>13</sup>. Resultados análogos têm sido obtidos para o sulfureto de carbono  $CS_2$ , benzeno  $C_6H_6$ , azoto, oxigénio, bromo e acetoneitrilo  $CH_3CN$ .

O conhecimento da funções de distribuição  $g(r)$ , quer por via teórica quer por via experimental, permite chegar às propriedades termodinâmicas, mas agora não podemos restringir-nos a modelos de corpos rígidos; temos de entrar em linha de conta com as forças atractivas que estão na origem da elevada densidade dos líquidos. As forças repulsivas permitem interpretar  $g(r)$  mas são insuficientes para explicar quantitativamente as propriedades termodinâmicas macroscópicas. O conhecimento combinado de  $u(r)$  e  $g(r)$  contém já toda a informação necessária para o cálculo das várias propriedades, nomeadamente a energia total (interna); para um líquido de moléculas esféricas é

$$U = \frac{3}{2} NkT + 2\pi N\rho \int_0^\infty u(r) g(r) r^2 dr \quad (14)$$

O primeiro termo corresponde à contribuição da energia cinética e o segundo à da energia potencial, calculada na base da aditividade dos potenciais intermoleculares. Com efeito,  $\rho g(r)$  é a densidade numérica local, e o integral faz a soma das energias de interacção de todos os pares, quando a coroa esférica  $4\pi r^2 dr$  varre o espaço de integração.

O cálculo directo de integrais como o de (14) é difícil, entre outras razões porque  $u(r)$  se torna infinito para  $r=0$ . O problema pode-se resolver aproximadamente, dividindo o potencial em duas partes — uma que contém a componente dura (repulsiva) do potencial e que constitui o potencial de referência, e a outra que contém a parte atractiva que é então tratada como uma perturbação da primeira. O sucesso destes métodos, chamados de *perturbação*, está na maneira como se faz tal separação: por um lado interessa que o potencial de referência dê origem a expressões facilmente calculáveis (por exemplo, o potencial de esferas rígidas); por outro interessa que o

desenvolvimento em série de perturbação seja rapidamente convergente, o que só acontece se as estruturas do fluido real e do fluido de referência forem semelhantes.

$$u(r) = u_0(r) + \gamma u_1(r) \quad (15)$$

$u_0(r)$  é, pois o potencial intermolecular do líquido de referência e  $u_1(r)$  a perturbação. O parâmetro  $\gamma$  caracteriza a intensidade da perturbação. As funções termodinâmicas são então desenvolvidas em série de potências de  $\gamma$ , em torno de  $\gamma = 0$ , fazendo no final  $\gamma = 1$ . A energia de Helmholtz vem

$$\frac{A}{NkT} = \frac{A_0}{NkT} + 2\pi \rho \int g_0(r) u_1(r) r^2 dr \quad (16)$$

onde  $A_0$  é a energia de Helmholtz do líquido de referência.

Tomando um líquido de esferas rígidas (de diâmetro variável com a temperatura) como referência, Barker e Henderson puderam calcular as propriedades termodinâmicas dum líquido com potencial realista, usando três termos do desenvolvimento em série<sup>14</sup> —  $A_0$ ,  $A_1$  e  $A_2$ . No entanto, uma escolha mais feliz de  $u_0(r)$  pode levar a uma convergência mais rápida: é o que acontece na teoria das perturbações WCA em que o potencial de referência contém *toda* a porção que varia rapidamente com  $r$ , como se indica na figura 10. Com este tipo de potencial

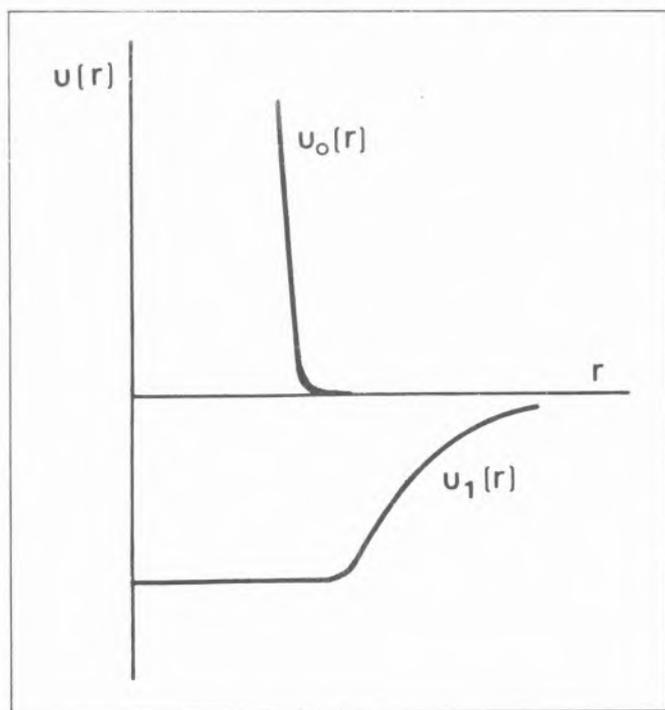


Fig. 10 — Potencial de referência  $u_0(r)$  e potencial perturbador  $u_1(r)$  na teoria WCA

de referência  $A$  pode ser calculado mais facilmente, pois a série converge com dois termos apenas.

É este problema da separação do potencial intermolecular em duas partes — uma de referência, variando rapidamente com as coordenadas, outra de perturbação, variando lentamente com  $r$ , que tem impedido o progresso da mecânica estatística dos líquidos de moléculas diatómicas.

## 5 — O Modelo Electrostático

Nos números anteriores vimos como a forma da molécula medida através do respectivo potencial repulsivo, pode explicar muitas das propriedades dos líquidos, nomeadamente aquelas mais relacionadas com a estrutura. Um outro tipo de teorias procura interpretar o comportamento dos líquidos e suas misturas na base de forças atractivas, essencialmente de natureza electrostática. Com efeito, exceptuando o caso dos átomos dos gases raros, as moléculas têm dipolos e/ou múltiplos (quadrupolo, octopolo, etc.) e é a interacção entre estas entidades de natureza eléctrica que está na origem do modelo electrostático. Quanto maior for a simetria da molécula, mais elevado é o primeiro multipolo não nulo. Assim, o cloreto de hidrogénio, HCl, é dipolar, o azoto,  $N_2$ , é quadrupolar, o metano,  $CH_4$ , é octopolar e o hexafluoreto de enxofre,  $SF_6$ , é hexadecapolar.

Na sua versão mais simples, o modelo electrostático, desenvolvido por Gubbins e seus colaboradores<sup>15</sup>, considera as moléculas como pontuais e sobrepõe-lhes uma série de múltiplos, o que confere anisotropia imediata ao potencial. De facto, os dipolos são vectores e os quadrupolos, etc. são tensores, de modo que a energia de interacção respectiva vai depender das orientações relativas no espaço. Dizemos que as moléculas são 'pontuais' porque o potencial de referência escolhido é esfericamente simétrico, em geral do tipo Lennard-Jones.

$$u(r, \omega_1, \omega_2) = u_0(r) + u^a(r, \omega_1, \omega_2) \quad (17)$$

A parte anisotrópica  $u^a(r, \omega_1, \omega_2)$  contém não só as forças de natureza electrostático-multipolar, como também as forças de indução, de dispersão e de sobreposição (repulsivas), isto é

$$u^a(r, \omega_1, \omega_2) = u^{mult} + u^{ind} + u^{disp} + u^{ov} \quad (18)$$

Em grande parte dos casos é o primeiro termo,  $u^{mult}$ , que contribui significativamente para  $u^a$ , podendo alguns dos outros termos ser desprezados. Em princípio, em  $u^{mult}$  devem ser incluídas as várias interacções possíveis: dipolo-dipolo, dipolo-quadrupolo, etc. Se designarmos o dipolo por  $\mu$ , o quadrupolo por  $Q$  e o octopolo por  $\Omega$ , temos as seguintes contribuições de significado evidente

$$u^{mult} = u^{\mu\mu} + u^{\mu Q} + u^{Q\mu} + u^{QQ} + \dots \quad (19)$$

O valor relativo destas parcelas depende de caso para caso (intensidade dos momentos, etc.) mas, a menos que se trate dos gases raros ou de moléculas tetraédricas, a importância do quadrupolo é inegável. Quanto às forças de indução, fundamentalmente atractivas, elas resultam do facto do dipolo dum molécula induzir um dipolo na segunda, que por seu turno vai interactuar com o dipolo da primeira, etc.; fazem intervir a polarizabilidade  $\alpha$ , e temos

$$u^{ind} = u^{\mu\alpha\mu} + u^{\mu\alpha Q} + u^{Q\alpha Q} + \dots \quad (20)$$

A energia de Helmholtz  $A$  é calculada a partir dum desenvolvimento em série de potências do potencial perturbador  $u^a$ , e a partir dela podem-se calcular as outras propriedades do sistema.

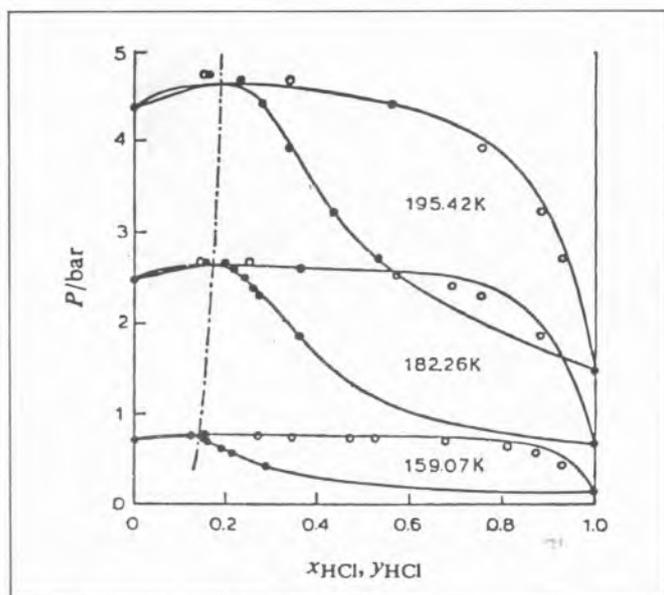


Fig. 11 — Equilíbrio líquido-vapor para soluções líquidas HCl + Xe; o, pontos experimentais; —, curvas teóricas, calculadas através do modelo electrostático (Ref. 16)

Esta figura é reproduzida, com autorização, do *Journal of Chemical Society Faraday Transactions Part 1*, Volume 74, pág. 904. © 1978 by The Chemical Society

Na figura 11 mostra-se a aplicação desta teoria ao caso do equilíbrio líquido-vapor das misturas de xenon com cloro de hidrogênio: os pontos são os resultados experimentais e as curvas foram traçadas teoricamente, independentemente daqueles<sup>16</sup>. O azeótropo é reproduzido, bem como o comportamento do sistema numa gama de baixas temperaturas, superior a 35 K, e isto apesar das complicações (ignoradas) devidas à existência das ligações por ponte de hidrogênio. E no entanto, algumas interrogações se levantam pois, como se sabe da electrostática, o desenvolvimento em série de multipolos não é válido para distâncias curtas, precisamente aquelas às quais estamos a aplicar o modelo electrostático. Por outro lado, qual o significado de grandezas como o momento dipolar, o momento quadrupolar, etc., no estado líquido, onde não há uma teoria satisfatória de dieléctricos para interpretar as propriedades de líquidos polares? O momento dipolar torna-se assim pouco mais do que um parâmetro ajustável.

Num artigo de revisão de 1977, Gubbins e Streett afirmavam que «as forças multipolares têm um grande efeito tanto na estrutura como nas propriedades de equilíbrio dos fluidos»<sup>17</sup>, e um ano mais tarde Chandler argumentava, em artigo similar, as suas «sérias dúvidas sobre qualquer teoria que recorra largamente a simples interações electrostáticas para interpretar a estrutura dum líquido»<sup>6</sup>, acrescentando em seguida que «infelizmente uma grande porção de teorias do estado líquido baseia-se em tais modelos», e referia os leitores para o artigo citado de Streett e Gubbins. Esta é uma das várias controvérsias que agitam hoje a físico-química dos líquidos. Mas as controvérsias são salutares fontes de progresso, e comparada com algumas do passado, a controvérsia forma-interacção multipolar não passa dum tempestade num copo de água... Por causa da lei da conservação da energia Lord Kelvin e Tyndall cortaram relações, e Dühring perdeu a sua cátedra. Hoje espera-se dos químicos mais compostura, já que não se lhes pode pedir génio igual...

## 6 — Final

No domínio da física e química dos líquidos estamos, pois, ainda no princípio. E o princípio é o dos líquidos simples, constituídos por moléculas pequenas. Mas não devemos desanimar, ou pensar que por serem pequenas e simples estas moléculas carecem de interesse prático. É por serem pequenas e simples que as respectivas substâncias se apresentam, em condições normais, no estado gasoso — e o ar que respiramos tem oxigénio e azoto. O simples é, em mais de um sentido, o fundamental, e ainda há pouco o professor Fraústo da Silva nos lembrou, na sua lição plenária, que a química da vida é, afinal, a química dos elementos leves.

Falamos dos gases raros, do argon e do cripton. Muito se tem dito e escrito sobre os abusos do argon da parte dos estudiosos do estado líquido, a tal ponto de estes serem frequentemente acusados de sofrer duma doença nova a que se chamou argonite aguda... Mas a sonda Pioneer que há semanas nos revelou alguns segredos de Vénus, disse-nos que a sua atmosfera é cerca de quarenta vezes mais rica em argon do que a da Terra. Para os habitantes de Vénus a argonite seria, pois, uma doença mesmo séria!

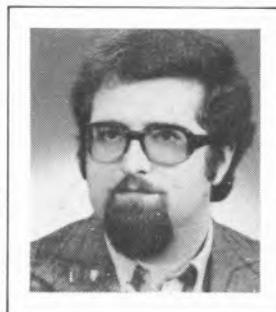
Vi há semanas em Londres um filme fabuloso, pela mitologia que evoca, pela encenação, pela esperança e pelo humor, e também pelo uso fascinante de cristais (estado sólido, o espaço da memória) no planeta mítico onde tudo começa — SUPERMAN. Como sabem o Superhomem vem do planeta Cripton, e a sua missão na Terra é lutar pela Verdade e pela Justiça. Que se levante pois o primeiro que negue o valor do Cripton!

## BIBLIOGRAFIA

- [ 5 ] J.S. ROWLINSON, *Chem. Soc. Revs.*, **7**, 329 (1978).
- [ 2 ] J.C.G. CALADO, M. NUNES da PONTE, V.A.M. SOARES e L.A.K. STAVELEY, *J. Chem. Thermodynamics*, **10**, 35 (1978).
- [ 3 ] I.R. McDONALD, in *Statistical Mechanics — A Specialist Periodical Report*, The Chemical Society, London, 1973.
- [ 4 ] ROBERT MUSIL, *Der Mann ohne Eigenschaften*, Rowohlt, Hamburg, 1952.
- [ 5 ] H.C. ANDERSEN, *Ann. Rev. Chem.*, **26**, 145 (1975).
- [ 6 ] D. CHANDLER, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **29**, 441 (1978).
- [ 7 ] J.D. WEEKS, D. CHANDLER e H.C. ANDERSEN, *J. Chem. Phys.*, **54**, 5237 (1971).
- [ 8 ] C.S. HSU, D. CHANDLER e L.J. LOWDEN, *Chem. Phys.*, **14**, 213 (1976).
- [ 9 ] C.A. NIETO de CASTRO, M. NUNES da PONTE e V.A. MEIRA SOARES, *Técnica*, n.º 417, 101 (1972).
- [ 10 ] J.A. BARKER e D. HENDERSON, *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 587 (1976).
- [ 11 ] W.G. HOOVER e F.H. REE, *J. Chem. Phys.*, **49**, 3609 (1968).
- [ 12 ] D. CHANDLER, C.S. HSU e W.B. STREETT, *J. Chem. Phys.*, **66**, 5231 (1977).
- [ 13 ] L.J. LOWDEN e D. CHANDLER, *J. Chem. Phys.*, **61**, 5228 (1974).
- [ 14 ] J.A. BARKER e D. HENDERSON, *J. Chem. Phys.*, **47**, 2856 (1967); *id.* 4714.
- [ 15 ] K.E. GUBBINS e C.G. GRAY, *Mol. Phys.*, **23**, 187 (1972); C.H. TWU, K.E. GUBBINS e C.G. GRAY, *Mol. Phys.*, **29**, 713 (1975). I
- [ 16 ] J.C.G. CALADO, C.G. GRAY, K.E. GUBBINS, A.M.F. PALAVRA, V.A.M. SOARES, L.A.K. STAVELEY e C.-H. TWU, *J.C.S. FARADAY I*, **74**, 893 (1978).
- [ 17 ] W.B. STREETT e K.E. GUBBINS, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **28**, 373 (1977).

\* Lição plenária proferida no 2.º Encontro Nacional de Química, Porto, 5 Janeiro 1979.

# INTERACÇÃO UNIVERSIDADE-INDÚSTRIA



C.A. Nieto de Castro  
I. S. T.

Realizou-se no dia 19 de Dezembro, no Complexo I, Instituto Superior Técnico, um Colóquio sobre «A necessidade de dados termodinâmicos e de transporte para o projecto tecnológico», que reuniu especialistas da Universidade e Indústria e a que assistiram bastantes estudantes. Do programa de 1 dia constaram 2 partes. De manhã realizaram-se três conferências:

1) Efeito da incerteza das propriedades de transporte no projecto de permutadores de calor e condensadores — C.A. Nieto de Castro (IST).

2) The estimation of the Transport Properties of Fluids — Philosophy and Methods — W.A. Wakeham (Imperial College).

3) Previsão de propriedades na extracção líquido-líquido — L. Soares — (Universidade do Minho).

Na parte da tarde realizou-se um Painel sobre «O Projecto Tecnológico em Portugal — Situação e Perspectivas», com a participação de L. Araújo e J. Machado (Quimigal), L. Alves (IST), J. Romero (Universidade do Minho) e J. Calado (IST). Da discussão então realizada salientam-se os pontos principais:

## A) Aspectos globais

- dificuldades de acesso a «know-how»
- domínio da tecnologia dos sectores ponta pelos países industrializados.
- projectos comprados pelas firmas portuguesas a firmas internacionais que por sua vez podem contratar firmas de «engineering» portuguesas.

## B) Limitações principais da Indústria a nível de PROJECTO

- a) Licenciamento de processos ao abrigo de patentes (Não há tecnologia própria em Portugal);
- b) Falta de acesso a dados termodinâmicos, propriedades de transporte, dados cinéticos, etc. — ausência de banco de dados;
- c) Falta de experiência na construção de fábricas da engenharia química portuguesa — Currículo.
- d) Financeiras: empréstimos normalmente estrangeiros que põem limitações na escolha de tecnologia;

- e) Dimensão da empresa: evita por vezes a incorporação de tecnologia própria.

## C) Assuntos em que já existe alguma participação nacional

### No domínio da química pesada:

- a) Elaboração de estudos prévios que conduzem a um projecto;
- b) Selecção de diferentes propostas das firmas de engenharia;
- c) Pequenas alterações no funcionamento da fábrica (Ex.: aumento de capacidade de instalação, melhoria rendimento de processo).

### No domínio da química fina:

- d) Algum equipamento já projectado e feito em Portugal;
- e) Estudos piloto em laboratório.

## D) O Problema da R & D na Indústria

- Países desenvolvidos fazem R & D porque na evolução técnica se chegou à mecanização, o que faz reduzir os quadros de pessoal nas actividades produtivas, que se desloca para actividades de elite dado o elevado nível de especialização.

- Existem obstáculos à colaboração entre Universidade e Indústria.

- a) Mentalidade de continuidade;
- b) Convencionamento de que para fazer qualquer coisa é preciso dinheiro;
- c) Falta de humildade de parte a parte;
- d) Inveja que nos leva a não utilizar o trabalho dos outros.

### Soluções:

- a) Melhor ligação pessoal entre quadros da Indústria e da Universidade;
- b) Execução de estudos de pormenor nas Universidades;
- c) Planeamento da ligação a nível de País;
- d) Estudo da possibilidade, a exemplo do que é feito noutros países, de as grandes empresas darem uma percentagem do volume

de vendas para investigação, a laboratórios de investigação ou à Universidade, com compensações fiscais (para as privadas e públicas);

- e) Formação/reciclagem/posgraduação;
- f) Banco de dados.

### Alguns comentários finais

A intervenção tem que ser programada — contratos para haver garantia de que o dinheiro da Indústria não é dissipado, e que o factor tempo é importante — disciplina de cumprir etapas.

Este colóquio, organizado pelo Centro de Química Estrutural, realizou-se com o patrocínio da Ordem dos Engenheiros (Secção Sul) e da Sociedade Portuguesa de Química, e teve o apoio do British Council.

## ENSINO DAS CIÊNCIAS NAS ESCOLAS SECUNDÁRIAS DA EUROPA

— Tradução de Mariana P. Pereira (Liceu de Queluz) de excertos de um artigo publicado na Newsletter de Novembro de 1979, vol. 6, n.º 4, pp. 5-9, da International Council of Associations for Science Education (ICASE).

A civilização ocidental está fortemente dependente de indústria, baseada na ciência, que só se pode manter desde que existam cientistas devidamente preparados e desde que a população em geral compreenda o que é a ciência e quais são os seus objectivos.

A importância das escolas secundárias no ensino das ciências não necessita de ser posta em destaque, pois as escolas secundárias têm uma função dupla. Por um lado devem preparar alunos para cursos universitários com componente científica. Por outro lado devem satisfazer as necessidades daqueles cuja educação formal termina ao deixarem a escola para entrarem no mundo do trabalho, no qual tanto as actividades profissionais com as de ensino são profundamente afectadas pela ciência. Para se atingirem objectivos tão diversos há que enfrentar dificuldades de carácter puramente prático, como a existência de professores e de material, a limitação de horários, as pressões de novos temas científicos, etc. Além destas dificuldades a situação ainda é mais complicada pois, ao contrário de muitos assuntos que são ensinados nas escolas secundárias, a ciência é dinâmica. É necessário encontrar a possibilidade de incorporar no currículo novos conhecimentos e princípios, o que só se consegue suprimindo ou reduzindo tópicos existentes; logo aqui há campo para discussão sobre se se deve dar ênfase aos factos ou aos princípios e como é que o aluno os deve aprender.

Não é possível nem desejável a existência de um sistema uniforme do ensino das ciências mas não há dúvida que é vantajoso conhecer como professores de outros países vêem tal ensino e o ministram. Tal conhecimento pode ser útil ao formular novas medidas no próprio país. Com estas considerações em mente representantes de oito países europeus (+1) reuniram-se em Luxemburgo, em Abril de 1979, para discutirem o ensino das ciências nas escolas secundárias. A

finalidade principal da reunião foi dar a conhecer como se processa o ensino das ciências, quais as atitudes intelectuais e sociais que o determinam e qual a linha a desenvolver na próxima década. A conferência revelou a existência de diferenças significativas de atitudes bem como diferenças importantes nas limitações — políticas, económicas, linguísticas, por exemplo — com as quais os professores de ciências têm que trabalhar. Até dentro de um mesmo país o ensino não é uniforme, principalmente, mas não só, por razões administrativas.

Os participantes manifestaram acordo no desejo de proporcionar uma formação científica para três tipos de alunos: para os que prosseguem estudos científicos em universidades, para aqueles cujo trabalho está ligado à ciência, e para os que necessitam de saber e compreender a ciência de modo que fiquem com um conhecimento geral para a sua vida que — umas vezes melhor, outras vezes pior — está dependente da aplicação apropriada da ciência.

A juntar às diferentes necessidades — e, em certa extensão, relacionado com estas — existe o problema de lidar com alunos de aptidões diferentes, uma situação que tem que ser enfrentada por todos os professores. Contudo, isto nem sequer representa um inconveniente: alguns professores consideram que ensinar numa aula na qual os alunos apresentam uma gama de capacidades intelectuais, pode ser estimulante tanto para o professor como para os alunos.

Um outro ponto em que há acordo geral é a existência entre os alunos do ensino secundário de antipatia para com a ciência, embora tal já não se esteja a verificar nalguns países, como o Reino Unido e a Alemanha. Apesar de haver acordo quanto à existência deste ponto, há opiniões

(+1) — Alemanha, Bélgica, Dinamarca, França, Holanda, Irlanda, Itália e Reino Unido.

diversas relativamente à causa do mesmo. Há um consenso que é de opinião que a antipatia manifestada é inerente ao próprio assunto: trata-se de um assunto abstracto, que não entusiasma e com um campo limitado para as emoções humanas. Contudo, talvez haja uma diferença entre ciência pura, vista como um exercício essencialmente intelectual, e as aplicações da ciência à vida diária.

Para muitos parece que o processo para superar esta antipatia é introduzir no currículo alguns assuntos que relacionem ciência e sociedade mas há opiniões divergentes sobre o processo da fazer tal introdução. Pode argumentar-se que a essência é estudar situações simples nas quais intervenha, se possível, uma única variável: deste modo, a causa pode associar-se ao efeito, e podem formular-se leis. Mas estudar o papel da ciência na sociedade é, de certo modo, estar no campo oposto, isto é, estudar situações muito complicadas determinadas por um grande número de parâmetros muitos dos quais não são identificáveis. Além disso é conveniente recordar que o aluno do secundário possui um conteúdo científico relativamente pequeno para poder formular ideias acerca da sociedade. Como situação de compromisso pode relacionar-se esse ensino não tanto com a sociedade no seu conjunto mas com o indivíduo: por exemplo, com a saúde do indivíduo. O debate de técnicas práticas e simples também dá origem a aulas úteis.

Embora esteja solucionado o problema de apresentar a ciência à sociedade, é importante que o currículo não seja rígido, ou então o objectivo não será alcançado. Tal como no ensino da ciência deve ser o próprio aluno a interpretar os factos, em vez de se lhe apresentar as explicações dos mesmos.

Nos países presentes na reunião tem-se verificado grande ênfase na reforma curricular mas os processos empregues têm sido diferentes. No Reino Unido, por exemplo, a multiplicidade de «examining boards» (+2) possibilita que num pequeno número de escolas se tentem novos métodos que, no caso de se verificar que não são eficientes, são abandonados sem que se tenham provocado grandes prejuízos. Isto não é possível fazer-se em países como a Itália e a França, nos quais existem sistemas mais rígidos e mais centralizados; nestes países qualquer alteração abrange todo o país, o que provoca graves prejuízos no caso da reforma não ser eficiente; isto constitui um forte incentivo para não se introduzirem reformas.

Também as associações profissionais de professores de ciências reflectem diferenças administrativas. Por exemplo, na Alemanha, na Holanda e no Reino Unido, as associações são grandes e activas e isto talvez reflecta o facto de exercerem uma forte influência na reforma

curricular. A Química Nuffield — um dos maiores desenvolvimentos dos últimos anos no ensino da ciência no Reino Unido — foi formulada por 202 pessoas, das quais pelo menos 199 eram professores em exercício. Em países em que o sistema de ensino é muito centralizado as associações de professores de ciências são muito mais pequenas possivelmente por não haver incentivo para formular ideias que têm pouca possibilidade de serem postas em prática.

---

NOTA — A SPQ possui alguns números da Newsletter da ICASE que poderão ser consultados pelos interessados. No número referido é feita a descrição do sistema de ensino existente nos países presentes na reunião.

---

# PERSPECTIVAS DE DESENVOLVIMENTO DA INDÚSTRIA QUÍMICA FINA EM PORTUGAL\*

M. Celeste Canongia Lopes  
M. Edite Soares Duarte  
M. Margarida Falcão

## RESUMO

A presente comunicação aborda os seguintes aspectos:

— Posição da Indústria de Química Fina no contexto da economia do País e características dos empreendimentos a realizar nesse ramo;

— Identificação das possibilidades de desenvolvimento de Química Fina em Portugal, com vista a criar uma indústria de tecnologia avançada e de fracas exigências de capital, a qual, terá efeitos positivos sobre a balança de pagamentos e poderá servir de meio de valorização de algumas matérias-primas nacionais. Os sectores abrangidos no estudo foram: matérias-primas farmacêuticas, matérias-primas para pesticidas, óleos essenciais e corantes.

## 1. Introdução

A designação de Química fina refere-se a um produto químico elaborado e tratado em quantidades relativamente pequenas e geralmente num estado bastante puro, o que implica um alto valor acrescentado e, conseqüentemente, um preço elevado.

A definição anterior abrange numerosos produtos com aplicações muito diversas.

Os produtos de Química Fina, à excepção das substâncias inorgânicas de pureza analítica e dos compostos de elementos raros, situam-se no campo da química orgânica. Os principais grupos de produtos que integram o ramo de Química Fina são: matérias-primas farmacêuticas e matérias-primas para pesticidas, corantes, óleos essenciais e derivados, aditivos alimentares, produtos tenso-activos e produtos fotossensíveis.

As indústrias consumidoras desses produtos são: farmacêutica, cosmética e perfumaria, alimentação, pesticidas, têxtil, plásticos, detergentes, fotografia, etc.

## 2. Panorama global do sector de Química Fina em Portugal

### 2.1. Posição do sector de Química Fina no contexto da economia do País

A indústria química, a nível mundial, tem registado uma expressão notável nas últimas duas décadas, apresentando níveis de crescimento superiores aos da indústria considerada no seu conjunto, devido em grande parte ao rápido cresci-

mento da petroquímica assim como à produção de produtos orgânicos de síntese e seus derivados.

Prevê-se que a indústria química, nos próximos anos, continue a apresentar uma tendência expansionista, com um crescimento superior à média do sector industrial. Enquanto nos anos 60 a indústria química sofreu uma transformação radical e sem precedentes, conduzindo à expansão da indústria petroquímica, os anos 70 anunciam uma evolução no sentido de diversificação das matérias-primas e um regresso à química do carvão.

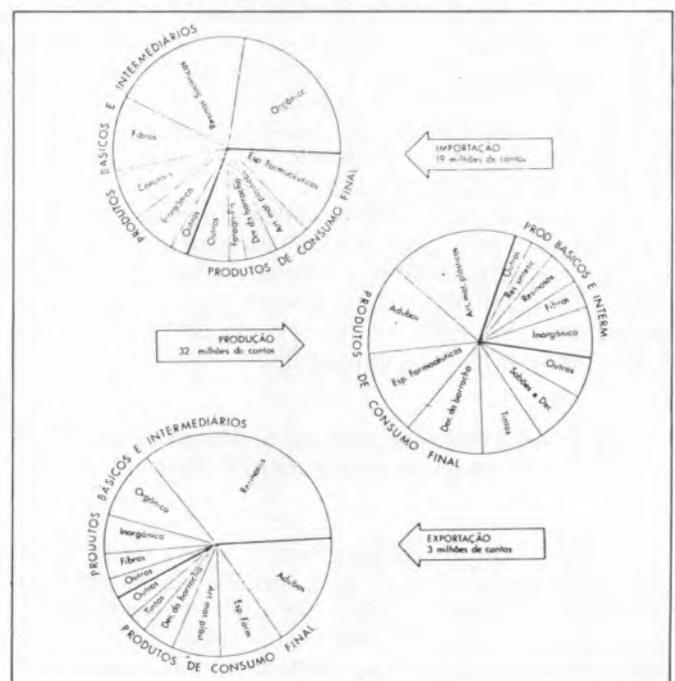
A indústria química em Portugal, embora apresente uma tendência expansionista, detém apenas uma posição de fraco relevo no panorama industrial do país, de que nos dá conta a sua participação no P.N.B. (inferior a 5%) e na exportação total (à volta dos 60%). A importação de produtos químicos é bastante mais significativa, representando cerca de 13% da importação global do país.

A estrutura actual da indústria química nacional é mais um índice do seu fraco estágio de desenvolvimento (Ver Anexo I e Gráfico I), pois a pro-

## GRÁFICO I

### INDÚSTRIA QUÍMICA

Estrutura da Produção, Importação e Exportação em 1976



\* Comunicação apresentada no Simpósio Nacional de Ciências e Tecnologia para o Desenvolvimento (JNICT-1979).

dução nacional centra-se essencialmente em bens de produção e/ou consumo final, apesar do crescimento médio da indústria química básica e intermediária ter sido significativo no período 1970/1974 (22,5% ao ano).

Em 1976 o valor bruto da produção nacional da indústria química cifrou-se em cerca de 32 milhões de contos, sendo a sua composição a seguinte: 21% de produtos de base e intermediários e os restantes 79% bens de consumo final.

Nesse ano as necessidades internas de produtos químicos de base e intermediários e de produtos químicos de consumo final foram satisfeitas pela produção nacional em 40% e 83% respectivamente.

Decorre do acima exposto que há necessidade de recorrer sistematicamente à importação de produtos químicos de base e intermediários. Em 1976 a importação total cifrou-se em cerca de 20 milhões de contos, 60% dos quais respeitaram a produtos de base e intermediários.

A exportação global de produtos químicos situa-se a um nível bastante abaixo, 3 milhões de contos em 1976, repartidos quase equitativamente pelos dois tipos de produtos.

A conjugação destes factos conduz a um agravamento do déficit comercial do sector químico (16 milhões de contos em 1976) e a uma taxa de cobertura de apenas 17%.

No contexto da indústria química nacional o ramo da **Química Fina** detém uma posição minoritária. Em 1976 a participação dos produtos de química fina (cerca de meio milhão de contos respeitante a matérias-primas farmacêuticas e a óleos essenciais) no V.B.P. da indústria química foi de 1,6%.

Em 1976 a importação de produtos de química fina atingiu cerca de 3,5 milhões de contos (18% da importação total do sector químico) situando-se, a exportação em apenas 300 mil contos (10% da exportação total); a balança comercial do sector é francamente negativa, cerca de 3,2 milhões de contos no ano acima referido, o que corresponde a ter duplicado em dois anos (1,6 milhões de contos em 1974).

A posição conjunta da indústria química e dos principais sectores consumidores desses produtos (Especialidades farmacêuticas e Pesticidas), no contexto da indústria química, era a seguinte em 1976: 16% no V.B.P., 30% na importação e 16% na exportação.

## 2.2. Interesse do desenvolvimento da indústria de Química Fina em Portugal

Em Portugal, como já foi referido, este ramo da indústria química está pouco desenvolvido, existindo produção nacional num número muito reduzido de áreas, embora grande número de empresas formulem e embalem produtos que têm a sua origem no sector de Q.F., pelo que neste campo a dependência do estrangeiro é quase total.

Os projectos a realizar neste sector apresentam determinadas características que lhe confe-

rem grande interesse potencial, sendo algumas delas particularmente relevantes na presente conjuntura económica, a saber:

1) São indústrias que apresentam características de versatilidade, podendo produzir uma ampla gama de produtos com o mesmo equipamento, dado os processos serem, regra geral, descontinuos. Parte do equipamento pode ser fabricado no país;

3) Os investimentos associados a essas indústrias não são necessariamente elevados, exigindo em contrapartida um apreciável nível tecnológico e mão-de-obra qualificada;

4) São empreendimentos que podem ser levados a cabo, com rentabilidade, a nível de pequenas e médias empresas;

5) Como indústrias de substituição de importações que são e estando as mesmas, regra geral, orientadas à exportação, contribuem para atenuar o déficit da balança comercial.

A importância económica do ramo da Química Fina, a essencialidade da maior parte dos produtos que a integram e as características acima referidas, mostram o interesse do fomento de empreendimentos neste campo da indústria.

## 3. Perspectivas de desenvolvimento do ramo da Química Fina em Portugal — Análise sectorial

### 3.1 Estudos empreendidos no campo da Química Fina

Estudos recentemente realizados sobre o sector de Química Fina confirmam a viabilidade de desenvolvimento local de determinados campos, sendo de salientar que a tecnologia envolvida pode, em vários casos, ser produzida no país, tanto mais que já existe um potencial tecnológico nesta área.

As linhas gerais do trabalho desenvolvido foram, em síntese, as seguintes:

— Os estudos efectuados abrangeram diversas áreas da Química Fina, a saber: matérias-primas farmacêuticas, matérias-primas para pesticidas, óleos essenciais e corantes.

— Partindo de uma lista de cerca de 500 produtos e eliminando, numa primeira análise, os de pouca representatividade económica em cada um dos subsectores acima referidos, chegou-se a uma lista de 150 produtos.

— Procedeu-se de seguida à recolha, sistematização, tratamento e interpretação de dados para os produtos listados, em termos de mercados, tecnologias e matérias-primas.

— A selecção dos produtos prioritários subordinou-se ao interesse que os mesmos apresentam no âmbito de uma política concertada de desenvolvimento industrial e tecnológico.

No ponto de vista de desenvolvimento industrial consideram-se como factores condicionantes os seguintes:

- a) Mercado interno: características e dinâmica
  - Volume e evolução da procura: produção e importação;
  - Estabilidade dos produtos (tempo de vida média);
  - N.º de produtos significativos;
  - Comercialização: tipo de concorrência, n.º de importadores e exportadores e quotas de mercado, sectores utilizadores.
- b) Disponibilidade de matérias-primas
  - Disponibilidade actual e potencial tendo em conta os recursos existentes no país e os projectos de investimento em curso, nomeadamente no campo da Petroquímica.

Em termos de desenvolvimento tecnológico os parâmetros determinantes são:

- a) Nível de desenvolvimento tecnológico existente no país no campo dos produtos de Q.F.
- b) Possibilidades de desenvolvimento interno das tecnologias necessárias ao crescimento da indústria local versus possibilidades e condições de importação dessa tecnologia.

### 3.2. Situação actual e evolução recente de alguns dos principais sectores de Química Fina

#### 3.2.1. Posição relativa dos sectores abrangidos pelo estudo

O Gráfico II mostra-nos qual era a situação dos sectores estudados em termos de consumo em 1974. Da sua observação pode concluir-se o seguinte:

— As matérias-primas farmacêuticas, consideradas em conjunto constituem o grupo com maior significado tendo o consumo interno desses produtos atingido cerca de um milhão de contos em 1974; salientam-se os grupos de «antibióticos», «hormonas», «vitaminas» e «outras matérias-primas farmacêuticas».

Nos oito grupos que integram este ramo, a dependência de fontes externas é notória, sendo de ressaltar, contudo, que no campo dos antibióticos o consumo interno já é satisfeito em cerca de 45% pela produção nacional.

— Em segundo lugar surgem os corantes, cujo consumo se cifrou em cerca de 640 mil contos em 1974, o qual foi satisfeito, na quase totalidade, pela importação.

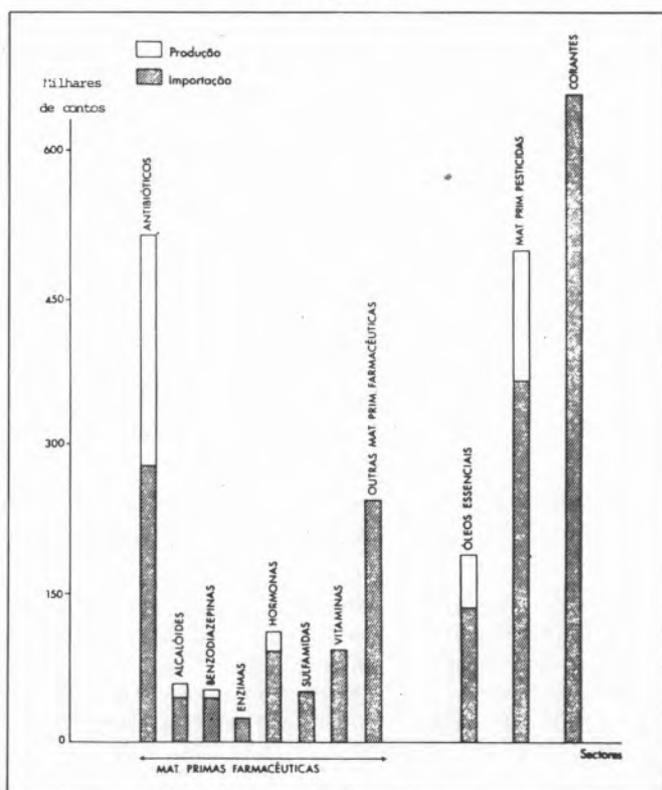
— O consumo de matérias-primas para pesticidas rondou os 500 mil contos; o fabrico local cobriu ¼ das necessidades internas.

— Os óleos essenciais representavam em 1974 o grupo com menor consumo, 185 mil contos, situando-se a participação da produção local nesse consumo em 30%.

Faz-se notar que estas conclusões devem ser encaradas com as necessárias reservas, dado reportarem-se unicamente a um ano e basearem-se em estatísticas de consumo aparente.

### GRÁFICO II

#### ESTRUTURA DO CONSUMO DE PRODUTOS DE QUÍMICA FINA — 1974 —



#### 3.2.2. Produtos farmacêuticos — Sector de especialidades farmacêuticas

O Quadro I retrata a evolução do consumo de especialidades farmacêuticas, decomposto nas duas componentes que o integram, para o período 1960-76.

Da análise do Quadro I ressalta:

— O consumo global de medicamentos cresceu no período 1960-74 a uma taxa média anual de 15%.

— Entre 1974-76, notou-se um crescimento espectacular da ordem dos 25% ao ano, sendo a principal responsável por este facto a componente

### Quadro I Consumo de medicamentos

(Preços de venda ao público\* — milhares de contos)

Anos	Produção nacional		Importação		Total	
	Valor	Índice	Valor	Índice	Valor	Índice
1960	418	100,0	553	100,0	971	100,0
1961	581	139,0	622	112,5	1203	123,9
1962	626	149,8	588	106,3	1214	125,0
1963	673	161,0	688	118,9	1331	137,1
1964	760	181,8	801	144,8	1561	160,8
1965	899	215,1	846	153,0	1745	179,7
1966	965	230,9	1013	183,2	1978	203,7
1967	1128	269,9	1105	199,8	2233	230,0
1968	1445	345,7	1285	232,4	2730	281,2
1969	1636	391,4	1517	274,3	3153	324,7
1970	1973	472,0	1630	294,8	3603	371,1
1971	2140	512,0	1715	310,1	3855	397,0
1972	2572	615,3	2019	365,1	4591	472,8
1973	3422	818,7	2018	364,9	5440	560,2
1974	3864	924,4	2384	431,1	6348	643,5
1976	6408	1530,0	3290	594,9	9698	998,8

\* Estes preços incluem as margens de comercialização do armazenista (10% sobre o preço de venda à Farmácia) e da farmácia (30 ou 20% sobre o preço de venda ao público, conforme o valor do medicamento seja até 10\$00 ou superior).

produção local, a qual cresceu a uma taxa média de 29%. Relativamente a 1976, a produção nacional contribuiu com a quota de 66% para o consumo global expresso em preços de venda ao público.

Refira-se que destes 66% apenas cerca de 1/3 é produzido por empresas totalmente nacionais.

A produção nacional de medicamentos encontra-se extremamente pulverizada, por unidades de dimensões muito variadas, embora com predomínio de empresas de pequena e média dimensão; em 1976, 70% das 78 unidades que integravam o sector, facturaram menos de 75 mil contos.

É igualmente de referir a forte participação de capital estrangeiro neste campo; das 78 unidades produtoras, 25 têm participação de capital estrangeiro, sendo a maioria das empresas desse grupo filiais de multinacionais.

As matérias-primas ocupam o primeiro lugar entre os diversos factores de custo do sector de especialidades farmacêuticas, representando em média, aproximadamente 1/3 do custo global.

#### — Sector de Matérias-primas farmacêuticas

Quanto à produção, existem as seguintes unidades fabris de substâncias activas farmacêuticas:

Empresa	Campo de actividade
Cipan.....	Antibióticos
Micofabril.....	Antibióticos
Hovione.....	Hormonas e Antibióticos
Quatrum.....	Hormonas
Uquipa.....	Alcalóides

A Hovione e a Micofabril têm participação de capital estrangeiro, sendo a segunda filial de uma empresa multinacional de origem holandesa.

As empresas Micofabril e Cipan desenvolvem a sua actividade no ramo dos antibióticos; a Micofabril actua no campo dos antibióticos por via fermentativa utilizando tecnologia da empresa-mãe e a Cipan no de antibióticos de fermentação e de semi-síntese, dispondo de tecnologia própria.

A Hovione e a Quatrum dedicam-se à síntese de hormonas a partir de produtos intermediários importados; a primeira das empresas fabrica alguns produtos sob licença de uma firma do Liechtenstein.

A Uquipa situa-se no campo da extracção, utilizando tecnologia própria (caso da esparteina) e tecnologia licenciada por uma empresa espanhola, para os restantes alcalóides.

Na segunda metade da década de 60 o crescimento registado pela produção de matérias-primas farmacêuticas foi bastante elevado, de cerca de 35% ao ano, tendo evoluído a um nível mais moderado na década de 70, à volta dos 12,5% ao ano. Assim, a produção que, em 1965, era de apenas 60 mil contos passou para 275 mil contos (4,5 vezes superior) em 1970, estimando-se que em 1977 fosse da ordem dos 630 mil contos.

Apresenta-se de seguida a estrutura actual (em 1977) e a evolução no período 1970-74 da produção local de substâncias activas farmacêuticas:

PRODUTOS	Posição relativa	T.m.c.a.
	%	%
Alcalóides.....	9	14,2
Antibióticos.....	76	15,6
Hormonas.....	15	— 2,8

— Relativamente ao comércio externo de matérias-primas farmacêuticas a evolução está patente no Quadro II.

A relação importação/exportação traduz claramente o forte desequilíbrio existente entre essas duas grandezas económicas, sendo de frisar que o desequilíbrio, que no início da década de 70 tinha sido ligeiramente atenuado, voltou a acentuar-se a partir de 1972; em 1977 a relação era de 6,3.

Os grupos de produtos com maior incidência na importação foram, em 1977, os Antibióticos (25%), Hormonas (13%) e Vitaminas (9%) para além do grupo de «Outras matérias-primas farmacêuticas», grupo esse muito heterogéneo, cuja

**Quadro II**  
**Evolução da importação e da exportação**

Anos	IMPORTAÇÃO		EXPORTAÇÃO	
	Valor (10 <sup>3</sup> contos)	N. <sup>os</sup> Índices	Valor (10 <sup>3</sup> contos)	N. <sup>os</sup> Índices
1965	154	100,0	60	100,0
1966	181	117,5	51	85,0
1967	187	121,4	28	46,7
1968	247	160,4	32	53,3
1969	303	196,8	55	91,7
1970	405	263,0	135	225,0
1971	521	338,3	158	263,3
1972	597	387,7	99	165,0
1973	889	577,3	137	228,3
1974	1207	783,8	201	335,0
1977	2500	1623,4	396	660,0

contribuição para o total se estimou ser de cerca de 33%.

Quanto aos grupos que apresentam taxas médias de crescimento anual mais elevadas no período 70-77, são de destacar os seguintes: Benzodiazepinas e «Outras matérias-primas farmacêuticas» (cerca de 50% em valor), seguidos das Sulfamidas (37,5%) e das Vitaminas (32,5%).

Existe uma grande concentração no tocante aos países de origem das importações, pois cerca de 95% dos fornecimentos provêm de apenas uma dúzia de países ocupando posições de destaque: a Alemanha Ocidental (26,5%), Itália (16,2%) e E.U.A. (12,3%); são também de referir o Reino Unido, França e Suíça, cujas quotas se situam entre 5 e 7%.

A exportação de substâncias activas farmacêuticas aproximou-se dos 400 mil contos em 1977 (cerca de 65% da produção). A sua evolução no período 65/77 sofreu oscilações sensíveis até aos princípios da década de 70, apresentando a partir de 1972 um crescimento mais regular. No conjunto, a tendência foi crescente, situando-se a taxa média de crescimento anual para o período 1970-77 em cerca de 16,5%.

As matérias-primas farmacêuticas exportadas dirigem-se para um largo número de países ocupando o Japão uma posição destacada, cerca de 44% em 1976; seguem-se a Holanda e os E.U.A. com cerca de 9%.

#### Em síntese:

— A gama de substâncias activas fabricadas localmente é bastante restrita face às múltiplas matérias-primas consumidas, pelo que há que recorrer em larga escala a fontes externas;

— A limitada capacidade de absorção do mercado interno aliada às restrições monopolísticas exercidas pelas multinacionais nesse mesmo

mercado, orienta estas unidades produtivas fundamentalmente para a exportação.

### 3.2.3. Pesticidas

#### — Pesticidas (produto formulado)

A produção e consumo globais de pesticidas apresentam a evolução indicada no Quadro III.

**Quadro III**  
**Evolução da produção e do consumo de pesticidas**

ANOS	PRODUÇÃO (TONS)	CONSUMO	
		TONS.	10 <sup>3</sup> CONTOS (P.V.P.)
1965	X	33.401,5	373,2
1970	26.481,5	27.654,4	640,6
1971	27.422,0	28.096,2	692,1
1972	31.514,2	30.784,1	777,0
1973	32.775,6	34.390,6	912,3
1974	34.102,7	34.543,5	1.083,8
1975	23.820,3	23.999,2	911,0
1976	31.495,7	50.701,4	1.462,5

Em termos de valor, o consumo total de pesticidas evoluiu, no período 1970-74, a uma taxa média anual da ordem dos 12,6; em tonelagem, o crescimento foi diminuto (+ 3%) o que deriva da alteração que se tem verificado na estrutura de consumo, alteração essa que se tem vindo a processar no sentido da introdução de pesticidas de preço médio mais elevado.

Os pesticidas classificam-se, segundo o seu objectivo final, em fungicidas, herbicidas, insecticidas, acaricidas, moluscicidas, nematodocidas, rodenticidas, antiabrolhantes e desinfectantes de sementes. Podem ainda ser classificados, segundo o sector de utilização, em: para usos agrícola, doméstico, industrial e para protecção animal e desinfestação.

O Anexo II mostra a estrutura da produção e do consumo por grandes grupos de pesticidas. Conclui-se dessas estatísticas: — A formulação local de pesticidas quase que satisfaz as necessidades internas; em 1970 o rácio produção/consumo, ambos expressos em toneladas, rondou os 96% tendo subido para 95% em 1974.

Os grupos de produtos com maior significado são, por ordem decrescente, os fungicidas, insecticidas e herbicidas, embora os primeiros tenham vindo a perder posição a favor dos outros dois grupos.

O sector agrícola é o que absorve a quota maior do consumo total, mais de 90% em quantidade e de 80% em valor. Essa percentagem tem vindo a diminuir progressivamente especialmente a favor dos pesticidas para uso doméstico.

O número total de firmas que desenvolvem actividade neste sector é de cerca de 40, respeitando esse número às empresas formuladoras e importadoras; grande número delas exerce simultaneamente as duas actividades. Tal como acontece na indústria formuladora de medicamentos, também neste sector existe um número significativo de filiais de multinacionais.

#### — Matérias-primas para pesticidas

No tocante aos princípios activos para pesticidas a situação é análoga à descrita para as substâncias activas farmacêuticas; neste campo apenas são fabricados localmente, pela Quimigal, o sulfato de cobre e o zinebe, pelo que o abastecimento desses produtos está largamente dependente de fontes estrangeiras.

No Quadro IV apresenta-se, por grandes grupos, a evolução da estrutura da importação de matérias-primas para pesticidas.

Salientam-se os seguintes aspectos:

— Posição predominante, nos dois anos referenciados, das substâncias activas para fungicidas, sendo de notar, contudo, a perda relativa de importância face aos restantes tipos de pesticidas.

O grupo que apresenta um crescimento mais elevado é o das matérias-primas para herbicidas (26%), atingindo em 1974 cerca de 1/3 da importação total.

A importação de matérias-primas para insecticidas duplicou no período considerado.

— Nos dois anos em análise é o grupo das matérias-primas para insecticidas que apresenta preços médios mais elevados, seguido dos herbicidas e fungicidas; o campo onde o acréscimo de preços foi mais notório foi o dos herbicidas (cerca de 60%), cifrando-se o aumento dos outros dois grupos na mesma ordem de grandeza, à volta dos 30%.

As substâncias activas para pesticidas são importadas de cerca de duas dezenas de países ocupando uma posição de destaque a França (37%) e a Alemanha Ocidental (25%).

#### 3.2.4. Óleos essenciais

No sector de óleos essenciais incluem-se quer os óleos essenciais propriamente ditos quer as for-

mulações em que aqueles entram associados a produtos aromáticos sintéticos, as quais são vulgarmente conhecidas por composições.

O país dispõe de condições climáticas e de solo propícias ao desenvolvimento de plantas aromáticas que crescem espontaneamente em diversas regiões e das quais se podem extrair óleos essenciais. Todavia esta fonte de riqueza encontra-se praticamente inexplorada.

Na verdade, a **produção nacional** de óleos essenciais centra-se quase exclusivamente no óleo de eucalipto campo onde, além dos muitos postos de destilação de óleo bruto, existem quatro empresas que procedem a uma rectificação de modo a obter óleo de eucalipto com várias percentagens de 1,8-cineol.

As empresas destiladoras e rectificadoras são:

Destiflora — Indústria Portuguesa de Destilação, Ld.<sup>a</sup>

Sociedade Agrícola Quinta da Cardiga, Ld.<sup>a</sup>

Socidestilda — Sociedade Portuguesa de Destilação de Óleos Essenciais, Ld.<sup>a</sup>

Sonol — Sociedade Nacional de Óleos, SARL.

Socidestilda está associada a uma empresa espanhola do mesmo ramo e contribui com uma quota de cerca de 50% para a exportação global de óleo de eucalipto.

No Quadro V apresenta-se a evolução da produção de óleo de eucalipto.

**Quadro V**  
Evolução da produção de óleo de eucalipto

Anos	Quantidade (Ton.)	Valor (Contos)	Preço médio (Esc./Kg)
1970	599,0	15 692	26,2
1971	734,0	20 536	28,0
1972	675,8	19 714	29,2
1973	663,0	28 780	43,4
1974	n.d.	109 735	170,0
1975	410,4	45 470	110,8
1976	443,3	49 491	111,6
1977	387,7	52 483	135,4

**Quadro IV**

Substâncias activas para:	1970			1974			T.m.c.a. Valor (%)
	Quant. (Tons)	Valor (contos)	Preço médio (Esc./kg.)	Quant. (Tons)	Valor (contos)	Preço médio (Esc./kg.)	
Fungicidas s/enxofre	5 058,2	124 700,3	24,6	6 207,6	201 760,5	32,5	12,8
c/enxofre	32 222,1	151 818,1	4,7	45 273,4	249 900,6	5,5	13,3
Insecticidas	306,2	19 306,0	63,0	474,8	40 696,9	85,7	20,5
Herbicidas	887,2	41 588,3	46,9	1 411,0	104 171,0	73,8	25,8
Outros pesticidas	299,3	3 955,4	13,2	308,8	8 338,4	21,9	20,5
Reguladores do crescimento das plantas	3,7	288,5	78,0	1,6	171,1	106,9	— 12,2
TOTAL s/enxofre	6 554,6	189 838,5	29,0	8 403,8	355 137,9	42,2	17,0
c/enxofre	33 718,5	216 956,3	6,4	47 469,6	403 278,0	8,5	16,7

Em anexo figura um mapa onde se apresenta a distribuição percentual dos pedidos de instalação de postos de destilação de óleos essenciais por distritos.

A importação de «óleos essenciais e derivados» tem crescido a um ritmo notável a partir da 2.<sup>a</sup> metade da década de 60 como as estatísticas seguintes nos mostram.

#### IMPORTAÇÃO

Anos	Quantidade (Ton.)	Valor (Contos)	Preço médio (Esc./Kg.)
1965 .....	147,5	26 939	182,6
1970 .....	391,8	61 145	156,1
1974 .....	595,1	135 194	227,2
1977 .....	951,7	311 930	327,8

No período 70-77 as taxas médias de crescimento anual foram de 13,5% em quantidade e de 26,2% em valor.

Parte substancial da importação respeita a «composições», sendo, em 1977, de 90% a sua quota no conjunto da importação.

Os principais países fornecedores de óleos essenciais e derivados são o Reino Unido, a França, a Suíça e a Holanda; as quotas desses países, em 1976, foram de 21,5, 20,4, 17,7 e 14,9% respectivamente. A Espanha e a Alemanha Ocidental detinham, nesse ano, uma quota de cerca de 8% cada.

Os sectores consumidores de maior relevo são o de perfumaria e o alimentar que em 1977, absorveram, respectivamente, cerca de 47% e 27% do valor global importado. Em volume as posições invertem-se o que se traduz em preços médios das composições de uso em perfumaria (= 670 esc./kg) triplos dos das composições de uso alimentar (= 200 esc./kg).

Relativamente à **exportação de óleos essenciais** refere-se:

A exportação tem-se cingido praticamente ao óleo de eucalipto com várias percentagens de 1,8-cineol.

Faz-se notar que a exportação do óleo de eucalipto tem estado sujeita a oscilações constantes: de 620 ton. em 1970, passou para 500 ton. e 392 ton. em 1974-1975 respectivamente; seguiu-se uma ligeira recuperação no ano seguinte (433 ton.) para descer novamente em 1977 (330 ton.).

Igualmente os preços médios de exportação têm registado alterações notáveis, como se pode ver pelas seguintes estatísticas:

Anos	Preço médio de exportação esc./kg
1970 .....	39,0
1974 .....	301,6
1975 .....	123,4
1976 .....	102,5
1977 .....	160,1

Em 1977 verificou-se uma exportação de «outros óleos essenciais» de cerca de 23,5 ton. em quantidade e de 1200 contos em valor e ainda exportações de composições, essencialmente para perfumaria, mas que não ultrapassaram os 4500 contos.

Os principais países para onde exportamos óleos essenciais (praticamente apenas o óleo de eucalipto) são os E.U.A., a França, a Alemanha Ocidental e o Reino Unido que, em 1976, chamaram a si 27,1, 19,0, 17,5 e 17,3%, respectivamente.

As quotas referidas para os E.U.A. e a Alemanha Ocidental são inferiores às verificadas para os mesmos países em 1974 devido ao aparecimento de novos mercados, nomeadamente a U.R.S.S. e os novos países de expressão portuguesa (para estes exportamos já as composições).

#### 4. Corantes

Em Portugal, o consumo de corantes é satisfeito quase integralmente pela importação, a qual é levada a cabo por um pequeno número de empresas, a maior parte das quais filiais de firmas multinacionais que actuam neste campo da indústria química.

No período 1970-77 a **importação global de corantes** apresentou, a seguinte evolução:

Anos	Importação		
	Ton.	Contos	Esc./kg
1970 .....	7 896,3	399 288	50,6
1974 .....	9 602,8	972 565	101,3
1977 .....	10 183,0	1 453 021	142,7

É de salientar que cerca de 70% da importação global respeita às «matérias orgânicas sintéticas» (campo cujos produtos se enquadram na designação de Q.F.), cuja importação atingiu um milhão de contos em 1977; o incremento médio registado por esse conjunto de matérias corantes foi de 8% em quantidade e 21% em valor.

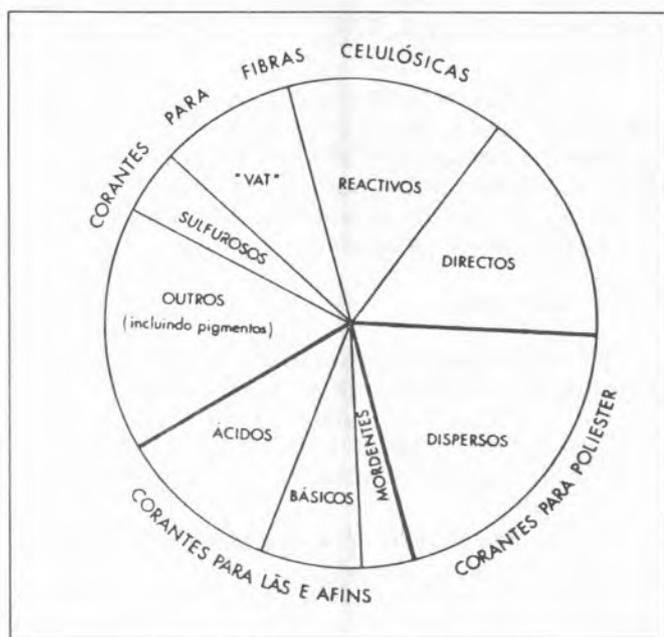
Os principais países fornecedores de corantes são a Alemanha Ocidental (44% do mercado nacional) e a Suíça (30%).

A estrutura da importação de matérias orgânicas sintéticas, por composição química, era para os anos de 1974 e 1977 a que a seguir se indica:

Designação	Posição relativa (%)	
	1974	1977
<b>Matérias orgânicas sintéticas:</b>		
Azóicas .....	45,8	47,2
Estilbeno .....	2,2	3,1
Difenilmetano .....	0,1	0,1
Triarilmetano .....	0,3	0,9
Metina e polimetina .....	2,6	0,08
Tiazol .....	0,05	0,07
Azina .....	0,11	0,17
Oxazina .....	0,31	0,47
Antraquinona .....	17,7	8,1
Ftalocianina .....	3,9	3,5
Outras .....	26,8	36,3

O principal sector consumidor dos corantes orgânicos sintéticos é o têxtil (o qual absorve cerca de 80%) pelo que o consumo de corantes está estreitamente dependente da estrutura de consumo dos diversos tipos de fibras pela indústria têxtil.

Em 1974 o consumo de corantes na indústria têxtil, classificados por tipo de aplicação, apresentava a seguinte estrutura:



NOTA — Estimativa baseada em dados de consumo de corantes e de consumo dos vários tipos de fibras recolhidos na C.R.P.Q.F., INE, Instituto dos Têxteis.

A evolução da estrutura de consumo de fibras têxteis em Portugal tem acompanhado a tendência mundial sendo de esperar que, de futuro, o consumo de fibras sintéticas ganhe maior relevo, dada a expansão prevista na indústria nacional de fibras acrílicas e poliésteres.

### 3.3. Análise prospectiva e projectos a desenvolver

#### 3.3.1. Conclusões genéricas

Os estudos realizados a nível sectorial e a nível do produto vieram confirmar o interesse inicialmente atribuído ao ramo da Química Fina, sendo de salientar como conclusões genéricas as seguintes:

- A procura interna de produtos de Química Fina tem evoluído a um ritmo marcadamente crescente prevendo-se no futuro, embora com uma eventual quebra desse ritmo, uma tendência ainda crescente;
- A comercialização no mercado interno destes produtos reveste diversas formas cujas situações limites são as seguintes: o produto é comercializado por uma única empresa a qual se encontra associada a um produtor estrangeiro,

que é o fornecedor do produto; o produto é comercializado por várias firmas as quais não têm ligações aos fornecedores estrangeiros. Este parâmetro merece ser devidamente ponderado aquando da selecção definitiva dos produtos a fabricar localmente.

Contudo, verifica-se que uma fracção significativa dos produtos analisados cai no segundo dos casos anunciados;

- Prevê-se que a penetração no mercado externo seja viável atendendo, simultaneamente, a dois factos: a exportação levada a cabo pelas empresas em actividade no sector, inclusivamente para mercados bastante rigorosos, e a inclusão desse tipo de produtos nas listas indicativas dos acordos comerciais e de cooperação económica, industrial e técnica que Portugal tem afirmado com diversos países do terceiro mundo e leste;
- Na década de 70 e no primeiro quinquénio da década de 80 um número significativo de patentes respeitantes a matérias-primas farmacêuticas e para pesticidas expiraram ou irão caducar, o que facilita o acesso à tecnologia em causa, podendo dispensar-se em alguns casos o recurso à importação;
- Existência de capacidade tecnológica nacional em alguns domínios (antibióticos, hormonas, alcalóides e óleos essenciais) pelo que o fabrico de produtos de tecnologia afim das tecnologias já conhecidas se afigura viável, embora seja de prever em alguns casos o recurso à importação de tecnologia dadas as características particulares de cada produto;
- O desenvolvimento de alguns campos de Química Fina possibilitará a utilização e valorização de recursos existentes no país e praticamente inaproveitados, nomeadamente plantas aromáticas e medicinais, e subprodutos de abate de gado.

No ponto seguinte apresentam-se as conclusões específicas de cada um dos subsectores estudados e enumeram-se os projectos que se nos afiguram de maior interesse.

#### 3.3.2. Matérias-primas farmacêuticas

##### 3.3.2.1. Perspectiva global

O consumo de medicamentos tem aumentado nos últimos anos a uma taxa média de 15% ao ano, prevendo-se que em 1977 se tenha cifrado em cerca de 12 milhões de contos, expresso em preços de venda ao público, o que confere a este sector um certo relevo sob o ponto de vista económico.

Da projecção do consumo de medicamentos, com base na tendência passada, resultam para os anos de 1980 e 1985 um consumo global de, respectivamente, 15 e 30 milhões de contos.

No que concerne às substâncias activas farmacêuticas, prevê-se que o nível de consumo interno se venha a situar em cerca de 2,5 milhões em 1980 e 5,6 milhões em 1985, o que equivaleria, aproximadamente, a uma duplicação em 1985 do consumo actual.

A selecção das matérias-primas farmacêuticas teve em conta critérios de natureza económica e tecnológica, pelo que se procedeu previamente à sua classificação de acordo com os critérios a seguir enunciados:

#### Classes tecnológicas

**Classe tecnológica I** — Extracção de plantas ou partes de plantas superiores e de órgãos de animais.

**Classe tecnológica II** — Extracção de caldos de cultura de bactérias ou fungos.

**Classe tecnológica III** — Síntese a partir de outros compostos químicos.

**Classe tecnológica IV** — Processo misto de extracção de caldo de cultura e síntese química (produtos semi-sintéticos).

#### Classes económicas

**Classe A, B, C** — Classes contendo produtos cujo valor unitário é superior a 10 000 Esc./kg.

**Classe A** — Valor de importação anual a granel inferior a 1000 contos/ano.

**Classe B** — Valor de importação anual a granel superior a 1000 contos/ano.

**Classe C** — Valor de importação anual sob forma de medicamento superior a 1000 contos/ano.

**Classe D** — Classe contendo produtos cujo valor unitário está entre 1000-10 000 Esc./kg. e com consumo superior a 1000 contos/ano.

**Classe E** — Classe contendo produtos com consumo superior a 10 000 contos/ano, qualquer que seja o preço unitário.

**Classe F** — Classe contendo os restantes produtos.

#### 3.3.2.2. Produtos seleccionados

##### A — Classe tecnológica I

À Classe I pertencem produtos de extracção de plantas ou de órgãos de animais.

No campo dos **produtos extraídos de plantas** seleccionaram-se oito plantas medicinais como sendo susceptível de interesse o fabrico local de alcalóides a partir delas (beladona, cila marítima, cólquico, dedaleira, papoila, passiflora, pervinca e valeriana). **Foi também considerado prioritário o estudo do aproveitamento da cravagem do centeio.**

Os **produtos extraídos de órgãos de animais**, que se globam na categoria de Química Fina

são: enzimas, heparina, hematóporfirina, extractos glandulares. Estes produtos constituem apenas uma fracção dos subprodutos da indústria de abate de agado e os valores globais desses produtos utilizados na indústria farmacêutica, só por si, não justificam a instalação de uma linha de fabrico.

Assim a obtenção de produtos de Q.F., extraídos de órgãos, deve ser concebida apenas como subsidiária de uma indústria de aproveitamentos de subprodutos do abate do gado.

#### B — Classes tecnológicas II e IV

À classe II pertencem os produtos extraídos de caldos de cultura e provenientes da actividade metabólica de fungos e bactérias.

De acordo com a natureza química dos produtos, processos de extracção e importância económica, esta classe admite uma subdivisão em enzimas e metabolitos não proteicos, nos quais se situam os antibióticos como os metabolitos de uso mais generalizado e de maior significado económico,

A Classe tecnológica IV é constituída, essencialmente, por antibióticos semi-sintéticos, pelo que abordaremos as duas classes conjuntamente.

#### Enzimas

Dado que o consumo de enzimas para fins farmacêuticos obtidas a partir de microrganismos (como sucede com as obtidas a partir de extractos de órgãos de animais) é marginal relativamente ao consumo nacional de enzimas, o assunto exige um estudo numa perspectiva mais ampla do que a contemplada neste trabalho.

#### Antibióticos

Os antibióticos constituem a família mais importante sob o ponto de vista económico e terapêutico.

A análise do consumo de medicamentos por «classes terapêuticas» revela-nos que os antibióticos ocupam um destacado 1.º lugar (cerca de 15% do consumo total).

Embora haja produção local de antibióticos (substâncias activas) a importação assume neste campo bastante peso, representando à roda de 25% do total da importação de substâncias activas (meio milhão de contos em 1977).

Embora exista um grande número de mercados fornecedores de antibióticos, o grosso da importação tem origem em três países, E.U.A., Reino Unido e Itália.

Foram seleccionados como produtos de primeira escolha cerca de 17 antibióticos (Classe I — de fermentação e Classe IV — de semi-síntese), entre os quais se destacam a **Gentamicina** e a **Rifampicina**.

Existindo no país prática no domínio dos antibióticos de fermentação e de semi-síntese, os antibióticos importados podem ser considerados de tecnologia afim das tecnologias já conhecidas, não se colocando, à partida, portanto, grandes dificuldades tecnológicas que inviabilizem estas produções.

Decorre da situação acima descrita que nesta área se deve incrementar a criação local de tecnologia, promovendo e incentivando a investigação, embora seja de prever que haja necessidade de importar tecnologia em determinados casos.

Acresce o facto de que a CIPAN tem exportado tecnologia para vários países, o que atesta a sua capacidade no campo do fabrico de antibióticos.

Faz-se notar que existem, contudo, condicionantes ao desenvolvimento da indústria local, e que são as restrições monopolísticas exercidas pelas empresas transnacionais quer a nível do mercado interno quer do mercado externo.

Esse aspecto deve ser devidamente ponderado pois cerca de 75% dos antibióticos importados correspondem a compras entre as filiais e as empresas-mãe.

Faz-se notar que as patentes referentes a alguns antibióticos, incluídos na presente análise, expiram no corrente ano e outras em 1985 e 1987.

### C — Classe tecnológica III

A esta Classe tecnológica pertencem os compostos de síntese que são os mais numerosos. É possível detectar, entre alguns deles, certas semelhanças de estrutura química ou a existência de grupos funcionais característicos, que permitem agrupá-los em famílias químicas onde o parentesco é estabelecido pela existência da mesma substância de partida ou idênticos intermediários de síntese. Na análise seguinte não entraremos com esse factor de diferenciação, tendo-se dado apenas tratamento separado às hormonas pelo facto de já existir actividade industrial neste campo e pela importância económica do mesmo.

#### Hormonas

Os medicamentos formulados à base de hormonas encontram-se entre os seis grupos terapêuticos com maior expressão no mercado nacional.

No contexto da importação de substâncias activas farmacêuticas as hormonas ocupam o segundo lugar, 250 mil contos em 1977 o que representou 13% da importação global de matérias-primas farmacêuticas.

As hormonas são, entre os produtos farmacêuticos, aqueles que apresentam preços médios mais elevados, atingindo os 63 contos/Kg. em 1977.

Entre os produtos analisados seleccionaram-se dezassete hormonas esteróides, integrando diversos sais (Classe económica B).

Analogamente ao referido para os antibióticos também se nos afigura viável o desenvolvimento interno deste grupo de produtos na medida em que existe no país capacidade tecnológica neste campo.

Conforme já foi referido, as duas unidades que actuam neste campo produzem hormonas a partir de intermediários de síntese importados, o que origina que o valor acrescentado no país seja relativamente baixo face ao que se obteria se o ciclo produtivo fosse integralmente efectuado em Portugal (os produtos intermediários representam mais de 55% do valor da produção).

Assim o desenvolvimento acima referido abrange não só o fabrico de novas hormonas mas também a melhoria da actual gama de produção no sentido de se caminhar para a síntese completa desses produtos.

Também nas hormonas se verifica a forte dependência importador/exportador referida para os antibióticos, pelo que, também neste campo, a selecção final de produtos a fabricar localmente deverá ter em conta esse aspecto. Os nossos principais fornecedores de hormonas (substância activa) são a Alemanha Ocidental (60%) e os E.U.A. (15%).

Número significativo das patentes pedidas por volta dos anos 50 e início da década de 60 e que cobrem a grande maioria dos produtos no mercado, já caducaram ou estão a caducar, passando os processos de fabrico ao domínio público.

#### Outros produtos de síntese

Este grupo de produtos é o mais numeroso, integrando produtos bastante diferenciados sob o ponto de vista terapêutico (Psicotropos, Anticolinérgicos, Antihistamínicos, Sulfamidas, Terapêutica Cardiovascular, Diuréticos, etc.)

Algumas dessas classes terapêuticas têm crescido, na presente década, a taxas médias elevadas, como a seguir se indica:

	T.m.c.a. (%)
Psicotropos.....	22%
Terapêutica Cardiovascular.....	28%
Antialérgicos.....	24%
Diuréticos.....	26%
Anticolinérgicos.....	17%

Dado o fabrico nacional de produtos de síntese se restringir às hormonas, o país encontra-se na total dependência do estrangeiro no que toca a este conjunto de produtos. Foram seleccionados como produtos de primeira escolha cerca de 45; este número ainda é bastante elevado pelo que se torna necessário um estudo mais aprofundado com vista à selecção final das matérias-primas de síntese que, numa primeira fase, interessará fabricar em Portugal.

Os principais países fornecedores são a Alemanha (R.F.), Bélgica, E.U.A., França, Itália, Holanda e Suíça.

### 3.3.3. Matérias-primas para pesticidas

O uso de pesticidas tem vindo a assumir importância crescente no nosso País, acompanhando a tendência geral que se verifica, neste campo, a nível mundial.

De acordo com os dados analisados verificou-se que a agricultura absorve cerca de 80% dos pesticidas consumidos. Dos contactos estabelecidos com técnicos agrários e dos elementos estatísticos disponíveis, constata-se que o nível de consumo de pesticidas em Portugal é ainda bastante insuficiente face às necessidades existentes, pelo que o mercado interno está longe de uma saturação.

Se tomarmos como base a tendência passada prevê-se que o consumo de pesticidas (produto acabado) ultrapasse os dois milhões de contos em 1980 e os 4 milhões de contos em 1985, a preços correntes.

No tocante ao consumo de matérias-primas para pesticidas estima-se que atinja os 850 mil contos em 1980 e 1700 mil contos em 1985.

A grande variedade de princípios activos utilizados conduz a consumos por produto relativamente diminutos constituindo este facto uma das condicionantes à sua produção local.

Enquanto que as matérias-primas farmacêuticas foram objecto de uma dupla classificação, tecnológica e económica, no campo das matérias-primas para pesticidas procedeu-se a uma única classificação, de ordem económica, pelo facto dos produtos considerados no estudo serem todos produtos de síntese.

Assim, adoptou-se a seguinte classificação:

**Classe A:** Inclui os produtos cujo valor unitário (Esc./Kg) é superior a 100\$00 e cujo valor de importação é inferior a 5000 contos.

**Classe B:** Inclui os produtos cujo valor unitário (Esc./Kg) é superior a 100\$00 e cujo valor de importação é superior a 5000 contos.

**Classe C:** Inclui os produtos cujo valor de importação é superior a 10 000 contos, qualquer que seja o preço unitário.

**Classe D:** Inclui os restantes produtos.

Os princípios activos para pesticidas que apresentam, sob o ponto de vista económico, maior interesse são de acordo com a classificação anterior os contidos nas classes B e C, pelo que o estudo incidiu precisamente sobre esses produtos.

**Foram seleccionados como produtos de primeira escolha oito princípios activos, tendo sido posteriormente escolhidos quatro como de maior interesse sob o duplo ponto de vista económico e tecnológico: amitrol, molinato, propanil e N-tri-cloro-metil-ftalimida.**

A importação destes produtos atingiu em

1974 cerca de 100 mil contos e 220 mil contos em 1977, o que representa um acréscimo médio anual de 30%.

Este projecto envolve, numa primeira aproximação, uma economia de divisas (entrando apenas em linha de conta com as matérias-primas fundamentais) de cerca de 110 mil contos de imediato e de 380 mil contos a médio prazo, aos preços actuais e admitindo uma incorporação de matérias-primas nacionais de cerca de 23% e de 80% respectivamente, a curto e médio prazo.

**Além destes produtos merecem estudo mais aprofundado o «oxicloreto de cobre» e diversos «ditiocarbamatos» (mancozebe, metirame e propinebe); o primeiro por apresentar um consumo bastante elevado no conjunto das matérias-primas para pesticidas e os segundos por serem produtos da mesma família do zinebe, princípio activo já fabricado pela Quimigal, conforme já se referiu.**

### 3.3.4. Óleos essenciais

Os recursos naturais de que o nosso País dispõe no campo das plantas aromáticas e a procura crescente de óleos essenciais a nível mundial oferecem boas perspectivas de crescimento a este ramo industrial.

Na verdade, apesar do incremento registado no campo dos produtos aromáticos sintéticos, estes não conseguem substituir integralmente os óleos essenciais e como a produção de óleos essenciais não acompanha a evolução da procura, verifica-se escassez destes produtos a nível mundial.

Em Portugal o consumo de óleos essenciais propriamente ditos, é bastante reduzido pois a indústria de composições (a jusante daquele), tem muito pouco significado no país. Decorre deste facto que a maior parte dos óleos essenciais que se vierem a fabricar no país terão que ser colocados no mercado externo, tal como sucede hoje com o óleo de eucalipto.

O interesse de empreendimentos neste campo é tanto maior quanto: — a tecnologia envolvida se encontra disponível no país (destilação) ou é relativamente simples e acessível (extração por solventes); — e o investimento associado a essas tecnologias não é muito elevado.

Na indústria de óleos essenciais o factor pessoal pesa relativamente pouco, pelo que este tipo de empreendimentos tem um efeito diminuto no campo do emprego. Em contrapartida o cultivo das plantas aromáticas ocupa um número significativo de pessoas, contribuindo para a criação de postos de trabalho em zonas rurais ou pelo menos para atenuar em parte o subemprego que reina em algumas dessas zonas.

O conjunto de factores positivos acima referidos leva-nos a considerar a indústria de óleos essenciais um dos sectores prioritários no contexto da indústria química, importando que o seu desenvolvimento seja prosseguido de imediato, embora sujeito a um planeamento prévio.

Com base na experiência passada podemos afirmar, com relativa segurança, que o estabelecimento no nosso país de uma indústria de óleos essenciais conceituada a nível internacional, só será possível se o Estado exercer neste campo um papel dinamizador e coordenador.

Por um lado, a natureza e a amplitude das acções que precedem a fase industrial exigem necessariamente que seja o Estado a empreendê-las; por outro lado, as condições de competitividade que os óleos essenciais terão de apresentar apontam para a necessidade de o Estado exercer um controlo neste campo.

As acções a empreender poderão desenvolver-se segundo as seguintes etapas:

— Levantamento quantificado das espécies consideradas prioritárias (áreas e densidades dos povoamentos) em ordem a seleccionar um número reduzido de plantas que constitua a base de arranque desta indústria em Portugal;

— Estimulo da cultura das espécies seleccionadas nos terrenos adequados e não aproveitáveis economicamente para produções alimentares de forma a que se possa dispor de matéria-prima em quantidade suficiente que permita o seu aproveitamento à escala industrial, criando para o efeito incentivos de diversa natureza, a exemplo do que se passa noutros países, nomeadamente em Espanha;

— Apoio às unidades produtoras de óleos essenciais no tocante às técnicas de fabrico e à comercialização dos produtos nos mercados externos.

A qualidade dos produtos, devendo constituir um objectivo a atingir em qualquer indústria, torna-se uma questão de sobrevivência para as indústrias viradas à exportação. Assim se passa com os óleos essenciais, devendo por isso a sua produção apresentar regularidade, quer em quantidade quer em qualidade, única forma de conseguirmos penetrar no mercado mundial e ir adquirindo a posição a que, pelas potencialidades do País, se nos afigura possível ascender. Para a concretização deste objectivo torna-se imperioso que se proceda a ensaios prévios com as várias tecnologias disponíveis de modo a obter produtos de boa qualidade e a assegurar as especificações exigidas pelos consumidores.

Julga-se que o Estado deverá ter uma acção importante neste domínio, quer normalizando os óleos produzidos quer controlando a qualidade dos mesmos.

Por outro lado encontrando-se a indústria de óleos essenciais virada para a exportação e estando as vendas destes produtos frequentemente sujeitas a oscilações (nas quantidades e nos preços) considera-se prioritário o estudo da política de crédito e de auxílios fiscais a definir para este sector, nomeadamente em épocas de crise, a exemplo do que se tem vindo a praticar noutros ramos, como no dos produtos resinosos, sector com o qual a indústria de óleos essenciais tem bastantes pontos comuns.

— Fomento do desenvolvimento da indústria de composições, praticamente inexistente no país e cujo peso na importação é assinalável, à medida que se for dispondo de alguns óleos essenciais.

Em 1977 a importação global cifrou-se em 300 mil contos (950 ton), 90% dos quais respeitaram a composições. A extrapolação da tendência registada no período 1965-77 conduz a um consumo global de óleos essenciais e composições de 1600 tons em 1982, que valorizado a preços de 1977 corresponderia a cerca de meio milhão de contos (Ver Gráfico).

Pensa-se que neste domínio, a curto prazo, apenas se poderá ingressar em campos menos nobres, tais como composições para produtos de higiene doméstica, a não ser que alguma empresa multinacional do ramo se instale em Portugal com o objectivo de fabricar composições.

A integração deste ramo industrial poderá ser implementada através de legislação adequada.

— **Numa primeira análise, as plantas aromáticas que apresentam maiores possibilidades de serem cultivadas em Portugal com vista ao fabrico de óleos essenciais são as seguintes: alecrim, calaminta, esteva, funcho, gerânio, lírio florentino, mangerona, poejo.**

### 3.3.5. Corantes

No contexto dos sectores de Química Fina considerados no estudo referido, o ramo dos corantes ocupa a segunda posição em termos de consumo, atingindo a importação de corantes orgânicos sintéticos um milhão de contos em 1977.

Admitindo a manutenção das condições de mercado existentes nas últimas duas décadas, estima-se que o consumo de corantes atinja, em 1980 e 1985, respectivamente 4600 e 6500 toneladas o que, a preços de 1977, corresponde a 1,4 e 2,0 milhões de contos.

Embora seja provável que o consumo de corantes não cresça a um ritmo tão elevado como o registado no período 1970-77, dada a eventual desaceleração da indústria têxtil, esse facto não é de molde a retirar interesse ao estudo de viabilidade do fabrico local deste tipo de produtos.

A instalação de uma indústria de corantes em Portugal reveste-se, em nosso entender, de certa importância sob o duplo ponto de vista de desenvolvimento industrial e tecnológico.

No que toca ao primeiro aspecto há a referir: a implantação de uma unidade de corantes, originando um acréscimo algo significativo no consumo de alguns produtos intermediários de origem petroquímica, contribui para o fortalecimento da malha industrial, podendo funcionar como um dos motores para um desenvolvimento integrado da indústria da química orgânica em Portugal.

No concernente ao segundo aspecto parecem-nos de salientar que a instalação de uma unidade de corantes, pela tecnologia que envolve, represen-

taria um passo positivo no desenvolvimento tecnológico do país.

Considera-se, contudo, que as características dos empreendimentos neste ramo industrial, nomeadamente:

- capacidades mínimas económicas;
- investimento vultoso;
- comercialização dos produtos;

constituem de algum modo, condicionantes ao desenvolvimento do sector em Portugal face à situação estrutural e conjuntural do país.

Primeiramente, a reduzida dimensão do mercado interno representa, à partida, um dos óbices à instalação de uma unidade de corantes pois há que ter em conta as economias de escala.

A rápida obsolescência a que estão sujeitos, em geral, os produtos de Química Fina, verifica-se com maior nitidez no campo dos corantes, o que constitui um factor adicional de dificuldade à instalação local de uma unidade, pois esta circunstância exige uma actualização permanente da gama de produção.

Por último, as empresas que comercializam corantes têm que seguir a aplicação destes produtos junto dos utilizadores, aspecto este que assume uma importância não inferior à da produção propriamente dita. Como já referimos, uma parte importante dos corantes destina-se ao sector têxtil; no mercado interno a indústria têxtil integra um grande número de empresas de dimensão e características muito variadas, assumindo a assistência técnica, prestada pelas empresas vendedoras de corantes, grande importância para as unidades de menor dimensão.

Assim, uma unidade de corantes para satisfazer aquela necessidade terá de ter um laboratório bem apetrechado e dispor de pessoal especializado. Relativamente a este último quesito, pensamos que o seu preenchimento não acarretará dificuldades quer pelo facto de já na Universidade do Minho serem leccionados cursos de engenharia têxtil quer por existirem na indústria têxtil técnicos com larga experiência no campo da aplicação de corantes.

**Face ao quadro acima descrito pensa-se que a instalação de uma unidade de corantes em Portugal só será viável através de uma «joint venture» com uma empresa com experiência neste campo, que além de fornecer as técnicas de produção e de comercialização assegure acesso aos produtos intermediários em condições competitivas bem como a colocação do excedente da produção nos mercados externos.**

#### 4 — Conclusões

Um dos principais problemas que o país enfrenta no sector químico é o da dependência tecnológica do exterior. A política produtiva do país, neste como noutros ramos da indústria, tem-se fundamentado quase exclusivamente na importação de tecnologia.

No caso particular da Química Fina pode-se concluir da experiência passada que este ramo tem merecido escasso interesse aos empresários

nacionais, atitude esta que, dado as perspectivas de desenvolvimento que o sector se nos afigura apresentar, só será explicável pelo domínio monopolístico que empresas transnacionais exercem tanto no mercado interno como externo.

Somos de opinião que importa alterar a presente situação o que exige a intervenção directa do Estado no sentido de dinamizar um processo que vise o desenvolvimento sustentado da indústria de química fina sob o duplo ponto de vista tecnológico e industrial.

Só se poderá aspirar ao desenvolvimento racional e sustentado das indústrias de química orgânica fina se for definida uma política tecnológica adequada, a qual, em última instância, deve visar criar um justo e eficaz equilíbrio entre a criação de tecnologia própria e a importação selectiva de tecnologia, para que o saldo negativo da balança tecnológica não cresça de uma forma indefinida e se estabilize a um nível razoável face aos recursos e capacidade do país.

Torna-se pois indispensável uma política concertada nos domínios da transferência de tecnologia e da investigação e desenvolvimento.

No concernente ao primeiro aspecto assistiu-se no passado à importação de tecnologia em condições extremamente lesivas dos interesses da empresa licenciada e, conseqüentemente, da economia do país, não só pelo seu elevado custo mas principalmente pelas cláusulas de natureza restritiva a ela associadas.

Este problema tem tido, entre nós, especial acuidade na indústria farmacêutica nomeadamente no campo das especialidades farmacêuticas, pelo elevado número de acordos de licença de fabrico existentes e pela natureza restritiva de muitas das cláusulas incluídas nesses contratos.

Pensa-se, contudo, que no domínio da transferência de tecnologia a situação está a evoluir de uma forma positiva dada a actuação coordenada que, nesse campo, está sendo levada a cabo pelo Instituto do Investimento Estrangeiro e o Ministério da Indústria e Tecnologia.

A forte dependência tecnológica em que o país se encontra só será atenuada se se desenvolver uma actividade nacional de investigação aplicada e de desenvolvimento experimental.

Toda esta problemática exige a fixação de objectivos e de estratégias que concorram para a realização daqueles. As condições estruturais e conjunturais do país levam-nos a considerar como ponto fulcral a definição de prioridades e a concretização de esforços nas áreas de desenvolvimento que vierem a ser estabelecidas.

Somos de opinião que o projecto de desenvolvimento de Química Fina deve ser considerado de uma forma integrada no sentido da sua implementação estar a cargo de um único órgão, interdisciplinar, e que terá uma função de coordenação.

Nessa perspectiva, torna-se indispensável assegurar a participação, no estudo subsequente, das diversas entidades com competência na matéria, nomeadamente M.I.T., JNICT, Centros Universitários, LNETI e Indústria.

## ANEXO I

## Evolução da Indústria Química

	1970	1974	1976	Taxas médias de crescimento anual (%)	
				70-74	74-76
1. Produção (10 <sup>3</sup> contos)	13 180	26 797	31 842	19,4	9,0
2. Importação (10 <sup>3</sup> contos)	5 613	14 544	18 088	26,9	14,2
3. Exportação (10 <sup>3</sup> contos)	2 329	5 292	3 251	22,8	- 21,4
4. Consumo aparente (10 <sup>3</sup> contos (1 + 2 - 3))	16 464	36 049	47 579	21,5	14,9
5. Produção/consumo (1/4) (%)	80,1	74,3	66,0	—	—
6. Exportação-Importação (3-2) (10 <sup>3</sup> conto)	- 3 284	- 9 252	- 15 733	—	—
7. Taxa de cobertura (3-2) (%)	41,5	36,4	17,1	—	—

## ANEXO II / Pesticidas — Evolução da Produção e do Consumo

PRODUTOS	1965			1970			1974		
	PROD. (TON.)	CONSUMO		PROD. (TON.)	CONSUMO		PROD. (TON.)	CONSUMO	
		TON.	CONTOS		TON.	CONTOS		TON.	CONTOS
— ACARICIDAS	x	—	—	0,5	5,5	866,0	52,8	54,4	8881,0
— ANTIABROLHANT.	x	93,3	2055,7	367,6	290,9	4476,8	141,1	153,2	3166,1
— DESINF. DE SEM.	x	558,1	2250,7	102,4	87,8	1973,8	113,9	88,4	1901,3
— FUNGICIDAS	x	31159,5	260033,7	22931,3	23477,9	358560,7	27024,9	27572,0	575896,2
Para fins agric.	x	x	x	22493,4	23016,9	352044,7	26710,1	26640,8	551531,8
Para usos domést.	x	x	x	—	—	—	1,8	0,6	52,9
Para a indústria	x	x	x	437,9	461,0	6516,0	313,0	930,6	24311,5
— HERBICIDAS	x	478,8	20082,5	1425,0	1815,4	110475,7	3122,8	3189,8	161227,1
— INSECTICIDAS	x	1577,1	84521,3	1595,0	1845,0	152526,4	3278,6	3101,2	311022,3
Para fins agric.	x	x	x	949,0	1124,6	80737,5	1839,8	1638,4	140763,4
Para usos domést.	x	x	x	623,3	572,7	64663,9	1404,8	1261,0	159330,3
Para prot. animal	x	x	x	3,2	24,7	3497,0	14,4	43,1	7731,9
Para a indústria	x	x	x	19,5	123,0	3628,0	19,6	158,7	3196,7
— MOLUSCICIDAS	x	5,3	213,4	2,3	19,3	1356,5	8,6	39,2	3082,0
— NEMATODICIDAS	x	—	—	7,4	43,3	1024,1	2,0	31,6	955,0
— RODENTICIDAS	x	29,4	4008,2	52,3	55,9	9120,4	352,2	303,3	17395,8
Para fins agric.	x	x	x	29,8	31,6	4567,5	318,0	234,6	12555,6
Para uso domést.	x	x	x	22,5	24,3	4552,9	34,2	68,7	4840,2
— OUTROS	x	0,0	1,8	—	2,7	186,0	5,8	10,4	235,0
TOTAL	x	33401,5	373167,3	26481,5	27654,4	640566,4	34102,7	34543,5	1083761,8

x — Não especificado

## ANEXO III

Distribuição distrital dos pedidos de instalação dos postos de destilação de plantas aromáticas (3)



## ANEXO IV / CENTROS UNIVERSITÁRIOS

- Centro de Processos Químicos das Universidades de Lisboa (CPQ/UL).
- Centro de Química Física e Radioquímica das Universidades de Lisboa, Linha de Síntese Orgânica (CQFR/UL).
- Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa (FF/UL).
- Departamento de Química da Universidade Nova de Lisboa (UNL).
- Secção de Tecnologia Química, Laboratório de Física e Engenharia Nucleares (TQ/LFEN).
- Centro de Química da Universidade de Coimbra, Linhas de Química Orgânica de Produtos Naturais e Macromoléculas e de Química Orgânica de Síntese (CQ/UC).
- Centro de Investigação em Química da Universidade do Porto, Linha de Química Orgânica (CIQ/UP).
- Centro de Engenharia Química da Universidade do Porto (CEQ/UP).
- Centro de Química Pura e Aplicada da Universidade do Minho (CQPA/UM).

# CONCEITO E MEDIDA DE TEMPERATURA

Idalina J. Domingos  
José A. Martinho Simões  
António J.D.F. de Mendonça  
Ângela F.S. Santos  
Instituto Superior Técnico

\* Trabalho baseado num seminário integrado na cadeira de Termodinâmica Química, realizado por I. J. Domingos, A. J. D. F. de Mendonça e A. F. S. Santos.

## 1 — CONCEITO DE TEMPERATURA

A noção de temperatura é, sem qualquer dúvida, o primeiro (e, por vezes, o único...) conceito termodinâmico a ser apreendido por um animal. Um bebé que não quer almoçar porque a comida está *fria*, um cão que se afasta da lareira porque está *quente*, possuem, basicamente, o mesmo sentimento de aversão por algo que lhes é «termicamente» desagradável...

Bem no meio do quente e do frio está o *neutro*: quando o bebé toca a mãe, do ponto de vista térmico, poderá nada sentir. Em termodinâmica tal facto é traduzido pela afirmação de que a existência de equilíbrio térmico entre dois ou mais sistemas termodinâmicos significa que é nulo o fluxo de calor estabelecido entre eles.

Uma análise mais profunda deste fenómeno revela que ele pode ocorrer independentemente das relações entre as propriedades mecânicas, eléctricas ou magnéticas dos dois sistemas — o volume, a densidade, a carga, a intensidade do campo magnético não têm normalmente influência no estabelecimento do equilíbrio térmico.

Surge, deste modo, como resultado directo da observação, o conceito de temperatura — uma propriedade que se pode definir para cada um dos sistemas termodinâmicos e cuja relação traduz o equilíbrio térmico referido. Contudo, é ainda necessário estabelecer qual a *relação* verificada entre as temperaturas dos sistemas quando eles se encontram em equilíbrio térmico. A maneira mais simples e óbvia de resolver o problema é admitir que se os sistemas termodinâmicos estão em equilíbrio térmico a sua temperatura é igual. Foi, de facto, o que aconteceu, tendo a hipótese ficado consagrada sob uma forma lapidar, conhecida por «Princípio Zero da Termodinâmica».

Existem vários enunciados do Princípio Zero, de entre os quais o devido a Caratheodory (1909) e a Born (1921) é, talvez, o mais conhecido: «Se dois sistemas termodinâmicos se encontram em equilíbrio térmico com um terceiro, estão em equilíbrio térmico entre si.» Como se nota, o enunciado, para além de conter a natureza empírica de temperatura, dá conta de uma propriedade transitiva inerente ao equilíbrio térmico entre os sistemas. Um pouco mais dogmático é o enunciado de Maxwell (1872), que «põe o carro diante dos bois» ao falar em temperatura e não em equilíbrio térmico: «Os corpos cujas temperaturas são iguais à de um outro, têm temperaturas iguais entre si.»

Em resumo, poder-se-á afirmar que a *temperatura é uma propriedade que determina se um sistema termodinâmico está ou não em equilíbrio térmico com outros sistemas*. Ao contrário do que sustentam alguns autores, como, por exemplo, Mach, a noção de temperatura não

«existe apenas pela nossa definição arbitrária, que podia ter sido qualquer outra». A temperatura, como propriedade da matéria, é fruto de uma descoberta e não de uma convenção. Convenção será, sem dúvida, a relação de igualdade que atrás se referiu, bem como a adopção de regras que quantifiquem essa propriedade — as escalas de temperatura.

O 2.º Princípio da Termodinâmica oferece uma alternativa para a descoberta da propriedade «temperatura». A existência de um fluxo espontâneo de calor entre dois sistemas, sugere que eles estejam a *diferentes* temperaturas. Recordem-se os sistemas almoço-bebé e lareira-cão. O sentido do fluxo determina qual é a temperatura maior.

As consequências desta nova definição de temperatura estão, como é evidente, bastante ligados a outras consequências do 2.º Princípio. Para citar apenas uma, basta recordar a construção da escala absoluta, que será focada adiante. No entanto, de um ponto de vista unicamente conceptual, com o 2.º Princípio pouco se avança na compreensão do significado físico da propriedade em estudo.

É a Termodinâmica Estatística que faculta uma interpretação, a nível microscópico, da temperatura. Segundo a teoria de Boltzmann, a temperatura é uma medida da energia cinética translacional média,  $\bar{\epsilon}$ , das partículas constituintes do sistema termodinâmico (ou «assembleia»):

$$\bar{\epsilon} = \frac{3}{2} kT \quad (1.1)$$

onde  $k$  representa a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura absoluta (vd. § 2).

É possível extrair duas conclusões relevantes da expressão precedente. Em primeiro lugar, o facto de a temperatura se relacionar com energia *média* e de, além disso, aparecer como uma consequência da teoria de Boltzmann, implica que a sua definição só faça sentido para uma assembleia que contenha um número suficientemente grande de partículas; ou seja, é desprovido de senso pensar em temperatura de uma só partícula. A segunda conclusão, não menos importante, advém do facto de a estatística de Maxwell-Boltzmann ser aplicável apenas a assembleias em equilíbrio termodinâmico. Microscopicamente isto equivale a afirmar que essas assembleias estão isoladas do meio exterior e que cessaram todos os processos de redistribuição de energia que lá possam ter ocorrido. Por outras palavras, numa assembleia em equilíbrio termodinâmico, qualquer reacção que se dê num dado sentido é contrabalançada por outra reacção em sentido inverso. Tal implica, em última análise, que a distribuição das partículas pelos níveis de energia aces-

síveis, bem como a repartição espectral do radimento, tomam valores estacionários, isto é, independentes do tempo.

A questão de somente ser possível definir temperatura em assembleias isoladas e em equilíbrio termodinâmico conduz a situações paradoxais, na medida em que tais assembleias não existem na prática. Mais: como se poderá descrever um fenómeno caracterizado por uma evolução da temperatura, por exemplo, um simples copo de água quente a arrefecer ao ar? De forma pragmática, resolve-se o assunto admitindo que a evolução da assembleia em causa se processa através de uma sucessão de estados de equilíbrio termodinâmico.

Um outro fenómeno, onde é ainda mais problemática a validade da definição de temperatura, prende-se com a existência de temperaturas *absolutas negativas*. Pense-se num conjunto de partículas, obedecendo à estatística de Maxwell-Boltzmann, apenas com dois níveis de energia acessíveis, designados por 1 e 2. A razão entre o número de partículas nestes dois níveis é dada por

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-\Delta\epsilon/kT} \quad (1.2),$$

sendo  $\Delta\epsilon$  a diferença de energia entre 1 e 2. Para se ter  $n_1 = n_2$  é necessário que  $T$  seja infinita; com  $T$  compreendida entre zero e infinito  $n_1$  é sempre superior a  $n_2$ ; finalmente, se se tiver  $n_2 < n_1$ , como  $\Delta\epsilon$  é, por definição, positivo,  $T$  tem que ser negativa! Longe de ser pura especulação, este raciocínio encontra confirmação no laboratório. Por exemplo, os spin nucleares do fluoreto de lítio, se expostos a um campo magnético, têm possibilidade de ocupar quatro níveis de energia. Porém, para simplificar a descrição, admita-se que são apenas dois os níveis acessíveis: um, o de mais baixa energia, ocupado pelas partículas cujo spin é paralelo ao campo; o outro, contendo os núcleos com spin antiparalelo a  $\vec{H}$ . De acordo com a expressão acima, em condições normais,  $n_2 < n_1$ , ou seja, a maioria dos spin estão alinhados com o campo. Imagine-se então que, num dado instante, se inverte o sentido do campo, tão rapidamente que os spin não são capazes de, no mesmo lapso de tempo, seguir essa alteração. Neste intervalo ter-se-á, portanto, uma autêntica *inversão da população* dos níveis, pois a maior parte das partículas, inicialmente no nível fundamental (alinhado com o campo), «vê-se» promovida ao estado excitado. Nestas condições,  $n_2 > n_1$  e  $T < 0$  K!

Não sendo novo, este problema reaviva a interrogação acerca da realidade da definição de temperatura. Dentro do critério mais ortodoxo não tem significado falar da temperatura de uma assembleia que não se encontra em equilíbrio termodinâmico nem está isolada. É precisamente isto o que se pretendeu demonstrar, ao chamar a atenção para as dificuldades que se erguem quando se pretende analisar o significado de um conceito como a temperatura, que, paradoxalmente, se define com rigor e se aplica a um mundo de (aparentes?) excepções.

## 2 — ESCALAS DE TEMPERATURA

Do que foi exposto sobre o significado físico de temperatura até ao método ou métodos de quantificar este conceito vai um passo muito breve.

Considere-se um líquido, por exemplo mercúrio ou álcool, contido numa pequena ampola de vidro que comunica com um tubo capilar. O estado deste sistema

simples pode ser especificado medindo o comprimento  $L$  assinalado na figura 2.1.

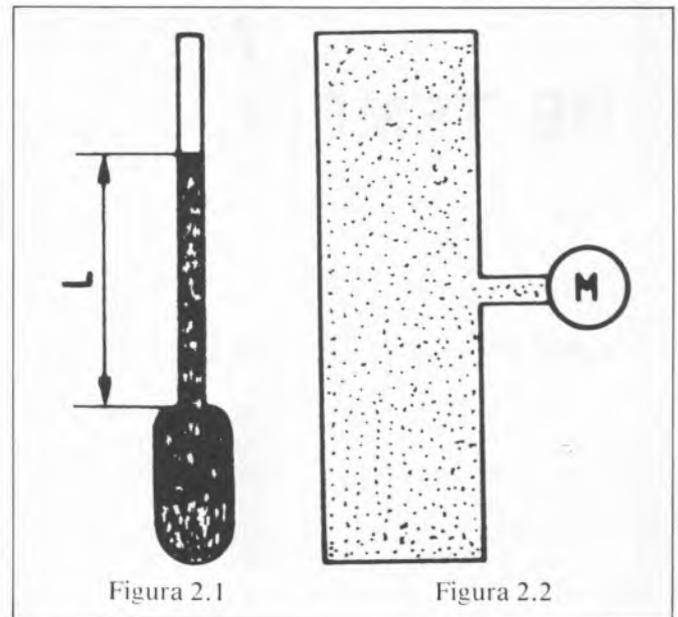


Figura 2.1

Figura 2.2

Figura 2.1 — O estado do sistema A é especificado pelo comprimento  $L$ .

Figura 2.2 — O estado do sistema B é dado pelo valor  $P$ , lido no manómetro  $M$ .

Um outro sistema termodinâmico, ilustrado na figura 2.2, consiste num recipiente de volume  $V$ , constante, contendo um gás, cuja pressão  $P$  lida no manómetro  $M$ , é agora a grandeza física que determina o estado da assembleia B.

$L$  e  $P$  são, assim, quantidades físicas que especificam os estados de A e B. Chamam-se, por isso, *coordenadas de estado*.

Quando os dois sistemas A e B são postos em contacto através de uma parede *diatérmica* (isto é, boa condutora de calor), as coordenadas de estado poderão variar até que, ao fim de um dado intervalo de tempo, se deixa de verificar qualquer alteração. O estado final a que chegam estes dois sistemas, quando cessaram as mudanças nas variáveis de estado, mais não é que um estado de equilíbrio térmico. Os sistemas A e B formam como que um único sistema termodinâmico, à temperatura  $\theta$ , o qual pode ser caracterizado quer por meio do desnível  $L$ , quer através da pressão  $P$ . Qualquer destas duas grandezas físicas é portanto, susceptível de ser encarada como uma *medida* da temperatura.

### 2.1 — Escala Celsius

Em princípio não haveria qualquer inconveniente em se usar valores de  $L$  ou de  $P$ , por exemplo, para medir  $\theta$ . Do ponto de vista prático, em virtude de isso não ser o mais conveniente, prefere-se criar uma escala própria para a temperatura. Para tal começa-se por estabelecer uma correspondência biunívoca entre a *propriedade termométrica*,  $X$  (que pode ser  $L$  ou  $P$ ), ou seja, faz-se

$$X = f(\theta) \quad (2.1)$$

Para fixar a forma de  $f(\theta)$  podem seguir-se muitos caminhos. O mais simples será porventura o de impor

que variações de  $\theta$  sejam directamente proporcionais a variações de  $X$ :

$$dX = a \, d\theta \quad (2.2),$$

ou, primitivando,

$$X = a \, \theta + b \quad (2.3)$$

As constantes  $a$  e  $b$  determinam-se facilmente desde que se conheça o valor de  $X$  a duas temperaturas distintas.

Estas temperaturas, designadas por *pontos fixos*, são, no caso da escala Celsius\*, a temperatura do ponto de ebulição normal (PEN) da água e a temperatura correspondente ao equilíbrio entre gelo puro e água saturada com ar, também à pressão atmosférica (gelo fundente). Têm-se, assim, respectivamente, o cem e o zero da escala.

A escala Celsius foi estabelecida pelo astrónomo sueco do mesmo nome, em 1742. Nessa época, a propriedade termométrica mais em uso era o desnível  $L$  de uma coluna de mercúrio. Não admira, portanto, que na definição da escala de Celsius se pense em termos de comprimentos. Logo, tem-se

$$\begin{aligned} \text{para } \theta = 0 & \quad b = L_0 \\ \text{e para } \theta = 100 & \quad a = (L_{100} - L_0)/100 \end{aligned}$$

Substituindo em (2.3) obtém-se

$$t = \theta = \frac{L - L_0}{L_{100} - L_0} \times 100 \quad (2.4)$$

Esta expressão permite calcular  $\theta$  desde que se conheça o comprimento  $L$ . Os valores de  $L_0$  e  $L_{100}$  são característicos do capilar utilizado.

A construção de um dispositivo que se baseie na escala Celsius, em especial se se tiverem exigências de exactidão, não é tarefa simples. Na realidade não é correcto dividir o comprimento  $L_{100} - L_0$  em cem partes iguais, admitindo que idênticos incrementos de  $L$  correspondem a idênticos aumentos de  $t$  (símbolo recomendado para  $\theta$  na escala Celsius; vd § 4): como o coeficiente de expansão cúbica do mercúrio varia com a temperatura, tal não se verifica. Mais: constata-se que dois capilares calibrados para 0 e 100°C não darão leituras idênticas a outras temperaturas, se forem construídos com materiais distintos (dois tipos de vidro). Por outras palavras, a expansão do mercúrio em relação ao vidro não é linear com a temperatura e a forma da curva varia de acordo com o tipo de vidro utilizado.

O problema, pode, no entanto, ser resolvido, quer usando vidros especiais, quer efectuando correcções devidas à não linearidade da dilatação.

## 2.2 — Escala Kelvin

A escala Celsius estabeleceu-se com base em dois pontos fixos. É, contudo, possível, construir uma escala, apenas tendo como referência um único ponto. Este é, aliás, o método «oficial», decidido em 1954, na Conferência Geral de Pesos e Medidas. A escolha do *ponto fixo padrão* caiu sobre o ponto triplo da água. Como se sabe, no ponto triplo de uma substância pura coexistem

as três fases — sólido, líquido e vapor — e isto só é verificado a uma dada pressão e a uma dada temperatura.

Feita esta opção é fácil construir uma escala. Considere-se que, à temperatura do ponto triplo da água,  $T_3$ , o nível do mercúrio no capilar da figura 2.1 é  $L_3$  ou a pressão do manómetro da figura 2.2 é  $P_3$ . Mais geralmente, se  $X$  for a propriedade termométrica, o seu valor àquela temperatura será  $X_3$ . Pode fazer-se

$$\frac{T}{T_3} = \frac{X}{X_3} \quad (2.5),$$

onde  $T$  é a temperatura correspondente ao valor  $X$  da propriedade termométrica.

À semelhança do que se afirmou sobre a expressão (2.2), a relação (2.5) é arbitrária. Poder-se-ia ter escolhido  $\sqrt{X/X_3}$ ,  $\ln(X/X_3)$ , etc. Aquela forma é, porém, a mais simples para servir como ponto de partida para a construção de uma escala de temperaturas.

O modelo do gás perfeito fornece um meio para se determinar  $T_3$  sem necessidade de se introduzir mais convenções. Pela equação  $PV = RT$  verifica-se que a medida da pressão a volume constante ou a medida de volume a pressão constante de um gás perfeito dariam uma verdadeira medida da temperatura. Embora não haja qualquer gás que, em rigor, verifique esta hipótese, é possível, como se verá adiante, fundamentar a medida de  $T$  na idealidade de um gás. E o que se verifica *experimentalmente* é que para reduzir o volume de um gás perfeito a zero, mantendo a pressão constante, é necessário que a temperatura seja de  $-273.15^\circ\text{C}$ . Ou seja, por cada grau que se diminui a temperatura de um gás perfeito, inicialmente a  $0^\circ\text{C}$  e ocupando um volume  $V$ , verifica-se uma contração de volume dada por  $(1/273.15)$  (fig. 2.3). Este o motivo porque, para passar da escala Celsius para a escala «absoluta», é preciso adicionar 273.15.

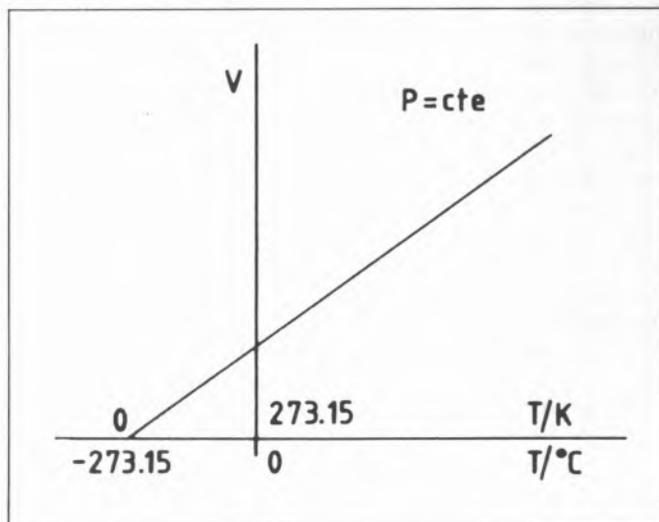


Figura 2.3 — Variação do volume  $V$  de um gás ideal em função da temperatura, mantendo a pressão constante

Uma outra concepção de *escala absoluta* é a chamada *escala termodinâmica*, devida a Lord Kelvin. Este cientista definiu iguais incrementos de  $T$  como intervalos entre os quais um motor que funciona conforme o ciclo

\*O adjectivo «centígrado/a» foi abolido por acordo internacional, na 9.ª Conferência Geral de Pesos e Medidas, em 1948.

de Carnot realiza idênticas quantidades de trabalho. Não é difícil demonstrar que as duas escalas referidas se identificam. Daí o nome de *escala de Kelvin* por que é normalmente designada a *escala absoluta*.

O conhecimento da temperatura do ponto triplo da água,  $0,01^{\circ}\text{C}$  ou  $273,16\text{ K}$ , permite então escrever a expressão (2.5) na forma.

$$T = 273,16 \frac{X}{X_3} \quad (2.6),$$

a qual permite calcular a temperatura  $T$  através de medidas de uma propriedade termométrica  $X$ .

### 2.3 — Outras escalas

A existência de várias escalas de temperatura é por motivos óbvios, um facto lamentável. Faz-se actualmente a tentativa de uniformização das unidades das grandezas físicas, impondo a utilização generalizada do Sistema Internacional. No que respeita à temperatura a sua unidade no SI é o Kelvin (símbolo K), que, como se viu, é igual a  $1/273,16$  da temperatura termodinâmica do ponto triplo da água. Todavia, são ainda de uso generalizado outras escalas, como a Rankine e a Fahrenheit, esta em especial nos países anglo-saxónicos.

A escala Fahrenheit, devida ao físico alemão do mesmo nome, foi estabelecida no início do século XVIII com base em três pontos fixos. Um, o «zero» dado a temperatura de uma mistura de gelo, água e um sal amónio; o segundo obtido a partir da mistura de água e gelo sem o sal de amónio; e o terceiro, correspondendo à temperatura de «um homem com saúde», tomada na boca. Os valores atribuídos a estes dois últimos pontos foram, respectivamente 32 e 96.

Uma outra versão da origem da escala Fahrenheit, que embora sendo apócrifa, revela um certo humor, diz que o zero foi obtido medindo a altura de uma coluna de mercúrio, num dia muito frio, no Inverno, em Londres, e, para marcar o cem, registou-se a altura da mesma coluna, num dia muito quente, no Verão, também em Londres! Inventada ou não, é certo que  $0^{\circ}\text{F}$  correspondem a  $-17,7^{\circ}\text{C}$  e  $100^{\circ}\text{F}$  a  $37,7^{\circ}$  — valores perfeitamente plausíveis...

Como se depreende, um grau da escala Fahrenheit não é equivalente a um grau nas escalas Celsius ou Kelvin. A conversão entre temperaturas nas várias escalas é feita pelas expressões indicadas na tabela 2.1. Aí aparece uma escala — a Rankine — que ainda não foi mencionada e que é particularmente usada em problemas de engenharia. Não é mais do que a escala absoluta correspondente à Fahrenheit. Tal como uma diferença de

temperatura igual a um grau Celsius equivale a um Kelvin,  $\Delta\Theta = 1^{\circ}\text{F} = 1^{\circ}\text{R}$ .

Refira-se, finalmente, que têm sido realizadas, algumas tentativas, mais ou menos pedagógicas, com o objectivo de criar novas unidades para a temperatura. O seu interesse é porém, demasiadamente limitado para que valha a pena descrevê-las. Menciona-se apenas a «escala MKS», proposta por J.C. Georgian [J. Chem. Ed., 43, 414 (1966)], em que a temperatura vem dada em Joules por quilomole!

## 3 — MEDIDA DA TEMPERATURA

Teoricamente qualquer propriedade (de qualquer substância), que varie com a temperatura, pode ser encarada como termométrica. A cor de um pedaço de ferro ao rubro, a viscosidade de um líquido, a velocidade de uma reacção química e, até, o aspecto de uma pessoa, são exemplos de fenómenos ou grandezas a partir dos quais é possível ter uma ideia mais ou menos exacta da temperatura desses sistemas termodinâmicos.

De um ponto de vista prático há, porém, que ter em atenção determinados requisitos para que o dispositivo de medida possa ser olhado como um *termómetro*. Essas condições são perfeitamente evidentes e justificam-se a si próprias: um termómetro deve: (1) ser exacto, (2) ser preciso (ou reprodutível), (3) atingir o equilíbrio térmico com rapidez, e (4) ser sensível (isto é, a propriedade termométrica deve variar bastante com a temperatura).

Estes factores podem ser conjugados de forma a que se possa atingir com segurança os objectivos que se têm em vista ao medir-se a temperatura.

Exemplificando, se se pretende obter a variação de temperatura num meio reaccional, com o fim de se determinar a entalpia da reacção, tem que se dispor de um termómetro muito sensível e reprodutível — a sua resolução é normalmente da ordem de  $10^4$  a  $10^5$  do Kelvin. Pelo contrário, quando se mede a temperatura de um forno, um erro de 10 K pode ser satisfatório.

Há, portanto, que escolher, de forma criteriosa, o dispositivo a usar para uma dada finalidade. Como se verá em seguida, existe hoje uma gama extensa de termómetros para todos os fins e exigências.

### 3.1 — Termómetros de Gases

Os termómetros de gases, que permitem medir a temperatura directamente na escala Kelvin, são raramente utilizados na prática, pois a sua construção e manuseamento não são fáceis e, por outro lado, são lentos a atingir o equilíbrio térmico.

TABELA 2.1 — Fórmulas de conversão entre as principais escalas de temperatura

II \ I	C	K	F	R
C	I	$K - 273,15$	$(F - 32)/1,8$	$(R - 491,67)/1,8$
K	$C + 273,15$	I	$(F + 459,67)/1,8$	$R/1,8$
F	$1,8 C + 32$	$1,8 - 459,67$	I	$R - 459,67$
R	$1,8 C + 491,67$	1,8	$F + 459,67$	I

I — Escala do valor inicial.

II — Escala para que se pretende a conversão.

No entanto, pelo facto de serem *absolutos* e de oferecerem uma elevada exactidão, precisão e sensibilidade, são usados para calibrar outros tipos de termómetros.

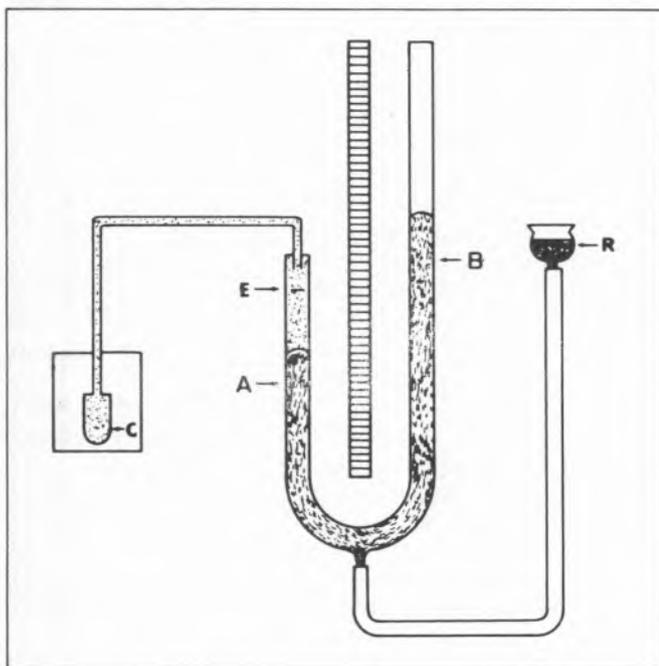


Figura 3.1 — Termómetro de gás a volume constante

O seu princípio de funcionamento é, porém, bastante simples. Atente-se na figura 3.1, que representa um termómetro de gás a volume constante. No bolbo C, imerso num banho cuja temperatura se pretende medir, encontra-se um gás a baixa pressão, a qual é medida através do desnível do mercúrio nos ramos A e B do manómetro. O volume de C + tubos de ligação ao manómetro é mantido constante fazendo subir ou descer o reservatório de mercúrio R, de modo a que o menisco em A coincida sempre com um traço em E.

Como se sabe, quanto maior for T maior será o desnível no manómetro. Imagine-se então que o banho onde o bolbo se encontra mergulhado está à temperatura de ebulição normal da água (373.15 K). A leitura da pressão dará um valor  $p_a$ . Aplicando a equação dos gases perfeitos obter-se-á um valor  $T_1$ . Note-se, todavia, que este resultado não é o verdadeiro valor da temperatura, uma vez que  $p_a$  é diferente de zero e, por consequência, em

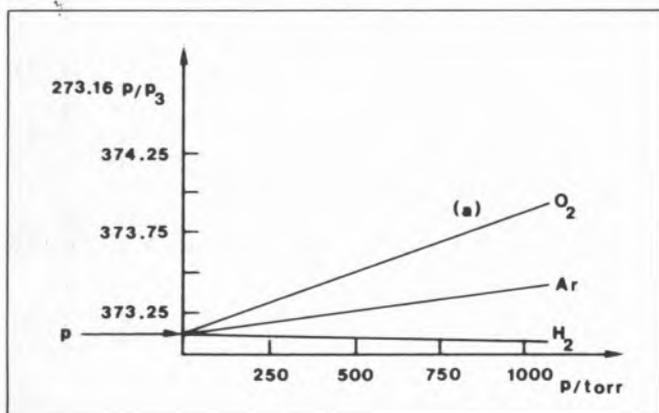


Figura 3.2 — Leituras feitas num termómetro de gás a volume constante, para três gases diferentes, no ponto normal de ebulição da água e a vários valores de p

rigor, não é válido o modelo ideal. (Vem a propósito recordar que este modelo é aplicável a qualquer gás desde que p tenda para zero).

O problema resolve-se de modo muito simples. Se se retirar uma dada quantidade do gás contido no bolbo C, a leitura da pressão será  $p_b$ , tal que  $p_b < p_a$ . Repetindo esta operação várias vezes, pode construir-se um gráfico com a curva (a) apresentada na fig. 3.2, no qual representa  $273.16 p/p_3$ , em função de p. (Note-se que as quantidades  $273.16 p/p_3$  se justificam através da expressão (2.6)).

Para se obter o verdadeiro valor da temperatura, basta extrapolar a curva para a pressão nula — o que, como se viu, equivale a considerar o modelo do gás perfeito:

$$T = 273.16 \lim_{p \rightarrow 0} \frac{P}{P_3}$$

Na figura 3.2 mostram-se mais duas curvas, obtidas com outros tantos gases, contidos no bolbo C. É de realçar a perfeita concordância entre os valores obtidos para a temperatura (ponto P da figura 3.2).

Como se disse, não se verifica uma aplicação corrente deste tipo de termómetros. Convém, no entanto, salientar a sua utilização em medidas de baixas temperaturas.

### 3.2 — Termómetros de Expansão

Os termómetros de expansão fazem uso da dilatação das substâncias como propriedade termométrica. O exemplo mais comum é o vulgar termómetro de mercúrio, onde a altura da coluna do líquido aumenta quando a temperatura cresce.

O próprio termómetro de gás pode ser usado como um termómetro de expansão, embora o que se meça seja, neste caso, a pressão.

Ainda que não se tenha mencionado, existe o termómetro de gás a pressão constante, que com mais justiça se pode integrar no grupo referido. O seu funcionamento é fácil de visualizar: fundamentando-se igualmente no modelo dos gases perfeitos, realizam-se leituras do volume, mantendo-se constante a pressão.

#### 3.2.1. — Termómetros de Mercúrio

Embora aparentemente simples, a medida da temperatura com um termómetro de mercúrio requer imensas precauções. Já no parágrafo 2.1 se chamou a atenção para este facto. Como se viu, os termómetros de mercúrio não são *primários*, isto é, torna-se necessário calibrá-los.

A calibração é feita com o termómetro completamente imerso num banho. Porém, quando, mais tarde, o utilizador se serve do mesmo termómetro, este encontra-se, em geral, com uma parte emersa, o que acarreta a existência de um gradiente de temperatura na coluna de líquido e no vidro. É, assim, necessário proceder a uma correcção do valor lido,  $t_l$ , o que se faz recorrendo à expressão aproximada.

$$0.00016 n (t - t_8) \tag{3.1}$$

que representa a quantidade (em °C) que se deve adicio-

nar a  $t_1$ ,  $t$  é a temperatura do bulbo do termómetro (normalmente faz-se  $t = t_1$ ),  $n$  é o número de graus da coluna emersa e  $t_1$  é a temperatura da parte emersa do termómetro; 0.00016 é o valor do coeficiente de expansão cúbica do mercúrio relativamente ao vidro.

Com este exemplo pretende-se chamar a atenção para o tipo de questões que é preciso resolver, de modo a obter um máximo de rigor com um termómetro de mercúrio.

A análise de tais problemas conduziu a inúmeros desenvolvimentos na concepção e construção destes dispositivos, desenvolvimentos que se traduziram na melhoria das suas características, em especial da sua exactidão — o limite superior do erro pode atingir os  $0.001^\circ\text{C}$ , em especial na gama de 0 A  $100^\circ\text{C}$ . A qualidade e o tratamento térmico dos vidros, são os principais responsáveis por estas elevadas «performances».

Teoricamente é possível elevar a exactidão de um termómetro de mercúrio, usando bulbos muito grandes e capilares cada vez mais diminutos. Porém, existe um limite para esta última dimensão, que se deve ao facto de o movimento do mercúrio se tornar irregular quando as forças capilares ultrapassam um dado valor. Na prática, verifica-se que a *sensibilidade* não pode ir além de 10 cm por grau.

A aplicação do tipo de termómetros em estudo é, em princípio, limitada pelo ponto de fusão ( $-38.87^\circ\text{C}$ ) e pelo ponto de ebulição normal ( $357^\circ\text{C}$ ) do mercúrio. Contudo, certas condições e usando vidros especiais, foi possível estender a gama até cerca de  $600^\circ\text{C}$ . Bastou, para isso, encher o volume do capilar acima do menisco do mercúrio com um gás inerte, a pressão elevada (20 atmosferas). Já o limite mínimo não pode ser ultrapassado, pois, como se sabe, a temperatura de fusão varia muito pouco com a pressão. Este o motivo porque se desenvolveram dispositivos em que o mercúrio foi substituído por outros líquidos com ponto de fusão mais baixo.

### 3.2.2 — Termómetros de Líquidos Orgânicos

A concepção deste tipo de termómetro é semelhante à dos de mercúrio. A única diferença é que no bulbo se encerra um líquido orgânico como etanol, tolueno ou pentano, o que permite medir temperaturas menores que a do ponto de fusão normal do mercúrio. No entanto, são múltiplas as desvantagens desta modificação. Os líquidos mencionados têm uma elevada pressão de vapor, facto que implica a tomada de certas precauções. Por exemplo, quando se arrefece um desses termómetros, a diminuição de temperatura deve ser lenta, pois, de outro modo, o vapor vai condensando nas paredes do capilar, não acompanhando a descida da coluna de líquido; o valor lido será, por consequência, inferior ao verdadeiro. Por outro lado, a não linearidade da escala é muito mais marcante que no caso do mercúrio (Ver § 2.1).

Não havendo grandes exigências, a substituição do mercúrio por líquidos orgânicos oferece a possibilidade de medir temperaturas até cerca de  $-200^\circ\text{C}$  (caso do pentano). Uma solução de compromisso consiste em utilizar como enchimento do bulbo uma amálgama de mercúrio e tálio, a qual mantém grande parte das características vantajosas do mercúrio e permite leituras até cerca de  $-50^\circ\text{C}$ .

### 3.2.3 — Outros Termómetros de Expansão

Como se imagina, existem muitas variantes de termómetros usando a dilatação dos corpos como propriedade termométrica. Nalgumas delas mantém-se o mercúrio mas substitui-se o vidro por metal, de molde a poderem ser utilizados em situações que provocariam a destruição do vidro. Outros termómetros de expansão, os *termómetros de pressão de vapor*, utilizam como medida da temperatura a pressão de vapor de um líquido (tolueno, cloreto de metilo, etc.), o qual enche parcialmente um reservatório que comunica com um capilar e um dispositivo de medida de pressão. Em virtude da não linearidade da pressão de vapor com a temperatura, a sua aplicação restringe-se a gamas de temperaturas relativamente pequenas ( $150$  a  $250^\circ\text{C}$  para o caso do tolueno;  $0$  a  $50^\circ\text{C}$  para o do cloreto de metilo).

Finalmente, cita-se os termómetros *bimetálicos*, constituídos por uma espiral de dois metais que possuem coeficientes de expansão diferentes, ligados entre si. A espiral distende-se quando sofre um aumento de temperatura e contrai-se em situação inversa. Estes movimentos fazem operar um ponteiro ou, mais frequentemente, uma caneta, a qual regista os valores de  $T$  ao longo do tempo. A exactidão dos termómetros bimetálicos não vai geralmente além de  $\pm 0.2^\circ\text{C}$ .

### 3.3 — Termómetro de Resistência

Incluem-se nesta classe de termómetros os dispositivos que utilizam a resistência eléctrica como propriedade termométrica.

#### 3.3.1 — Termómetros de Resistência de Platina

Os termómetros de resistência de platina são talvez os dispositivos mais frequentemente aplicados em medidas em que são requeridas grande exactidão e grande precisão. São constituídos por um fio de platina bastante fino (diâmetro geralmente compreendido entre  $0.05$  e  $0.20\text{mm}$ ), o qual é, nalguns casos, enrolado em espiral numa armação de mica. Para protecção, encerra-se o conjunto num tubo de prata ou de vidro de paredes finas. Estes detalhes não são, contudo, comuns a todos os termómetros de resistência de platina. Existem variantes e modificações para diversos fins. Por exemplo, para medidas acima de  $700^\circ\text{C}$  a mica é substituída por quartzo.

A variação da resistência da platina com a temperatura (acima de  $0^\circ\text{C}$ ) segue a lei quadrática

$$R_1 = R_0(1 + At + Bt^2) \quad (3.2),$$

onde  $R_1$  é a resistência à temperatura  $t/^\circ\text{C}$ .  $R_0$  é a resistência a  $0^\circ\text{C}$  e  $A$  e  $B$  são constantes determinadas com o auxílio de medidas no ponto triplo da água ( $0.01^\circ\text{C}$ ), no ponto de ebulição normal da água ( $100^\circ\text{C}$ ) e no ponto de fusão normal do zinco ( $419.58^\circ\text{C}$ ). Abaixo de  $0^\circ\text{C}$  usa-se a lei cúbica

$$R_1 = R_0[1 + At + Bt^2 + C(t - 100)t^3] \quad (3.3),$$

onde  $R_0$ ,  $A$  e  $B$  tomam os valores determinados para a relação quadrática e  $C$  é obtido recorrendo ao valor da resistência e da temperatura para o ponto de ebulição normal do oxigénio ( $-182.96^\circ\text{C}$ ).

O principal senão do tipo de termómetros em estudo é o pequeno coeficiente de variação de  $R$  com  $T$  que a platina apresenta: cerca de 0.4% por Kelvin. Um termómetro comum de resistência de platina tem uma resistência de 25.5  $\Omega$  a 273 K; assim, para se obter uma resolução de 10<sup>-4</sup> K há necessidade de detectar variações de  $R$  da ordem de 10<sup>-5</sup>  $\Omega$ . E isto é conseguido através de dispositivos (pontes de Wheatstone modificadas) cuja sensibilidade se paga muito cara... Aliás, o próprio termómetro não é barato, apresentando características de fragilidade que exigem um grande cuidado no seu manuseamento.

### 3.3.2 — Termistores

A principal desvantagem dos termómetros de resistência de platina — a baixa variação de  $R$  com  $T$  — é eliminada quando se usa um termistor, dispositivo que funciona de modo semelhante, mas que substitui a platina por um semi-condutor. O coeficiente de temperatura da resistência de um termistor pode variar entre 3 e 4% por Kelvin. Por outras palavras, e comparando os dois tipos de termómetros, entre 0 e 300°C a resistência de um termistor varia de cerca de mil vezes enquanto que a da platina apenas duplica. Para a mesma resolução os dispositivos de medida são, pois, bastante mais simplificados (e baratos...) para o termistor.

Há alguns anos os termistores não eram sistematicamente utilizados em medidas de grande exactidão, mau grado a vantagem apontada. O motivo deste facto residia em que eles não eram estáveis, contrariamente aos termómetros de resistência de platina: observava-se uma alteração progressiva das suas características com o tempo — fenómeno denominado «envelhecimento». Hoje, todavia, os termistores vêm já tratados (ou «envelhecidos») da fábrica e progressivamente vão tomando o lugar outrora ocupado pelas resistências metálicas.

Recorde-se, finalmente, que a variação da resistência de um semiconductor é oposta à verificada num metal. Assim, num termistor,  $R$  varia com  $T$  conforme a expressão

$$\ln R = A + \frac{B}{T + \theta} \quad (3.4),$$

onde as constantes  $A$ ,  $B$  e  $\theta$  são obtidas por calibração, medindo resistências a temperaturas conhecidas;  $T$  é a temperatura em Kelvin.

### 3.4 — Termopares

Se se ligarem dois condutores diferentes, de forma a formarem um circuito como o da figura 3.3, e se as duas soldaduras A/B e B/A estiverem a temperaturas distintas,  $t_1$  e  $t_0$ , verifica-se a passagem de corrente eléctrica no circuito. O valor da força electromotriz é uma medida da diferença  $t_1 - t_0$ . Este fenómeno, conhecido pelo nome efeito Seebeck, é a base de funcionamento do *termopar*.

Se  $t_1$  for a temperatura que se deseja medir é necessário conhecer  $t_0$ . Por isso, na prática, é hábito introduzir a *junção de referência* num banho de temperatura conhecida e constante. Na figura 3.4 encontra-se esquematizado um dispositivo experimental onde os condutores da *junção teste* são respectivamente de platina e de uma liga formada por 90% de platina e 10% de ródio; estes dois condutores encontram-se soldados a dois condu-

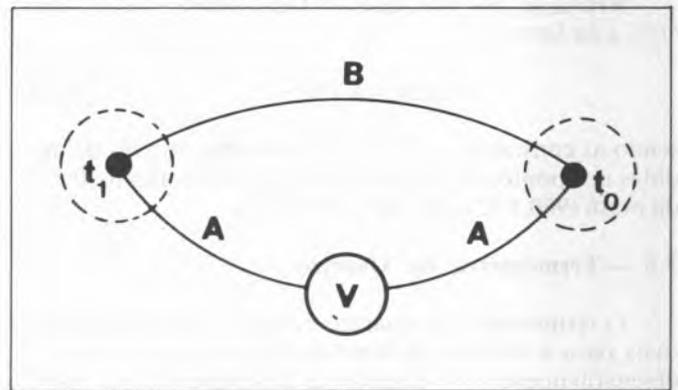


Figura 3.3 — Esquema de um par termoelétrico

tores de cobre (junções de referência) num banho à temperatura  $t_0$ , os quais ligam o termopar a um aparelho de medida da f.e.m. — um potenciómetro.

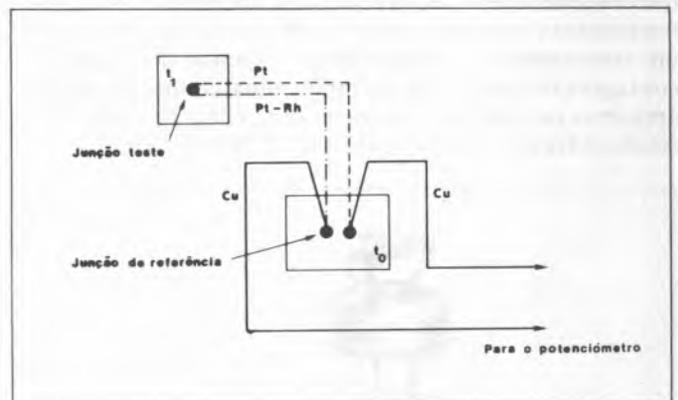


Figura 3.4 — Um Termopar

Talvez a grande vantagem do termopar consista na rapidez com que se atinge o equilíbrio térmico entre a junção teste e o sistema cuja temperatura se pretende conhecer. Este facto advém da pequena massa e dimensão da junção teste.

Não pode, contudo, comparar-se um termopar com os termómetros de resistência já descritos. A sua exactidão é pobre, em especial a temperaturas acima dos 600°C ( $\pm 1$  a 2°C). Mesmo a 100°C ela não chega sequer à apresentada pelos termómetros de mercúrio relativamente vulgares ( $\pm 0.02^\circ\text{C}$ ). Existem duas razões principais para este comportamento. Em primeiro lugar é difícil manter um banho a uma temperatura constante durante períodos longos; em segundo lugar, as variações de f.e.m. são pequenas e, para a grande resolução, é necessário usar-se potenciómetros de alta sensibilidade.

O desenvolvimento das «performances» dos termopares faz-se, pois, em três frentes: características do banho de referência, sensibilidade do potenciómetro e — «the last but not the least» — escolha dos materiais constituintes dos condutores. Como se apontou na figura 3.4, os mais comuns são de platina e de platina-ródio.

A principal aplicação dos termopares situa-se na medida de elevadas temperaturas (até cerca de 1500°C). Nalguns casos, na indústria e no laboratório, a junção de referência não está imersa em qualquer banho controlado, mas tão-só no ar ambiente. O que se mede é, pois, a diferença entre a temperatura do sistema e a temperatura ambiente.

Refira-se, por fim, que a relação entre a f.e.m. com  $t/^{\circ}\text{C}$  é da forma

$$\text{f.e.m.} = a + bt + ct^2 \quad (3.5),$$

sendo as constantes  $a$ ,  $b$  e  $c$  determinadas através de medidas nos pontos de fusão normal do antimónio ( $630^{\circ}\text{C}$ ), da prata ( $960.8^{\circ}\text{C}$ ) e do ouro ( $1063^{\circ}\text{C}$ ).

### 3.5 — Termómetro de Quartzo

O termómetro de quartzo é, entre todos os dispositivos para a medida da temperatura, o de mais recente desenvolvimento. A electrónica desempenha um papel fundamental na sua concepção, embora a sua propriedade termométrica seja conceptualmente muito simples: a variação da frequência de vibração de um cristal de quartzo com a temperatura. Este cristal (figura 3.5) gera uma frequência que varia de forma muito linear com  $T$ . Um contador adiciona os impulsos durante um certo intervalo de tempo, acha a média e apresenta o valor da temperatura num mostrador, imprime-o, ou fornece-o a um computador. A sensibilidade depende do tempo de contagem referido. Por exemplo, uma conhecida marca apresenta períodos de contagem de 0.1, 1 e 10 s com uma resolução respectivamente de 0.01, 0.001 e 0.0001 K.

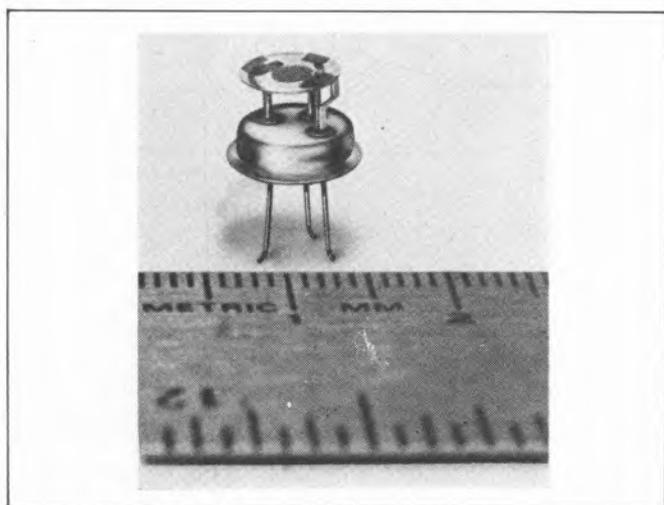


Figura 3.5 — Um cristal de quartzo no seu envólucro

Não merece a pena falar nas vantagens destes aparelhos: são bem evidentes. Quanto às restantes características, elas variam consoante os modelos comerciais — que estão em constante desenvolvimento. Muito se espera, ainda, da termometria de quartzo, em particular (como aliás, é usual nos casos em que a electrónica desempenha um papel relevante), uma substancial descida no custo dos termómetros...

### 3.6 — Pirómetros Ópticos

Quando se pretende medir uma temperatura muito elevada aparece o problema da destruição do instrumento de medida. Em certos casos é, pois, necessário que a medida possa ser efectuada sem que haja contacto físico entre o instrumento e o sistema.

A teoria quântica da radiação oferece um meio adequado para resolver a questão, através da lei de Planck ou dos seus corolários, a lei de Wien ou a lei de Stefan-



Figura 3.6 — Um termómetro de quartzo

-Boltzmann. Sendo impossível descrever em poucas linhas a base teórica de todas estas leis apenas se dirá que se se comparar as intensidades das radiações (com uma dada frequência) emitidas por dois corpos a temperaturas diferentes, o quociente dessas intensidades vem, segundo a lei de Planck, dado por

$$Q = \frac{\exp(C_2/\lambda T_2) - 1}{\exp(C_2/\lambda T_1) - 1} \quad (3.6),$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda,  $T_1$  e  $T_2$  as temperaturas absolutas e  $C_2$  é uma constante.

Se o produto  $\lambda T$  não for muito grande a equação (3.6) escreve-se na forma mais simples (lei de Wien):

$$Q = \frac{\exp(C_2/\lambda T_2)}{\exp(C_2/\lambda T_1)} \quad (3.7),$$

Qualquer uma destas relações fundamenta a utilização do *pirómetro óptico*, cujo esquema é mostrado na figura 3.7.

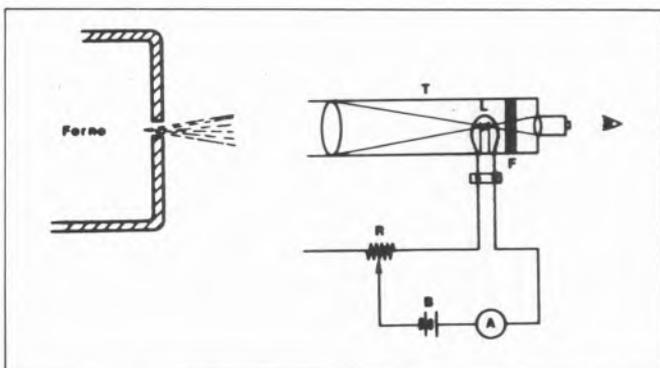


Figura 3.7 — Esquema simplificado de um pirómetro óptico

O dispositivo é essencialmente constituído por um telescópio  $T$ , no qual se encontra montado um filtro  $F$  (que selecciona o  $\lambda$ ) e uma pequena lâmpada  $L$  de intensidade regulável. Quando o pirómetro é dirigido para o corpo cuja temperatura se quer medir, o observador verifica uma diferença de tonalidade entre o filamento escuro da lâmpada e o fundo brilhante da fonte emissora. Procura-se então levar o filamento à mesma tonali-

dade do fundo, variando, para tal, a intensidade de corrente com o auxílio do reóstato R.

Em trabalhos de precisão a parte óptica do pirómetro é, evidentemente, mais sofisticada, o mesmo acontecendo com a parte eléctrica. No entanto, uma das principais fontes de erro deste método consiste em que as leis mencionadas são apenas válidas para o chamado «corpo negro», isto é, um corpo que absorve toda a radiação incidente e que, quando aquecido, emite a máxima quantidade de radiação possível. As substâncias normais afastam-se mais ou menos deste conceito e, por isso, é preciso efectuar correcções aos valores de T obtidos com o pirómetro — o que por vezes é extremamente difícil.

A calibração dos pirómetros ópticos é feita através da medida da intensidade da radiação emitida por um dispositivo que se aproxima do «corpo negro», à temperatura de fusão normal do ouro (1064,43°C).

Um outro tipo de pirómetros que vale a pena mencionar são os chamados pirómetros de radiação total. O seu princípio de funcionamento baseia-se na mencionada lei de Stefan-Boltzmann, a qual relaciona a radiação total (não apenas a radiação correspondente a uma dada frequência) emitida com a quarta potência da temperatura absoluta. Consistem, geralmente, numa superfície não reflectora, tendo uma pequena capacidade calorífica, cuja temperatura pode ser medida por termometria de resistência ou por termopares.

Na maioria dos casos é difícil assegurar que se mede a radiação total, uma vez que há bandas atmosféricas que absorvem fortemente no infravermelho ( $H_2O$  e  $CO_2$ ) e, por isso, os pirómetros de radiação total nunca são utilizados para medidas muito precisas e exactas.

### 3.7 — Termómetros para a gama das baixas temperaturas

Todos os termómetros descritos possuem um limite, abaixo do qual não se revelam adequados para medir a temperatura. Os termómetros de resistência de platina podem, em certos casos medir temperaturas até 10 K; no entanto, nesta gama, prefere-se a substituição do metal por resistências de carbono ou de germânio, cujo coeficiente de temperatura é negativo. Por outro lado, os termómetros de gás estão limitados pela pressão de vapor do hélio (o gás que liquefaz à menor temperatura), a qual é já inferior a  $2 \times 10^{-4}$  atmosferas a 1 K. Há assim necessidade de recorrer a outras propriedades para obter valores da temperatura. A mais utilizada é a susceptibilidade (X) de um sal paramagnético que obedeça à lei de Curie,

$$X = \frac{C}{T} \quad (3.8)$$

em que C é a constante de Curie, característica do sal utilizado, e T é a temperatura absoluta. A susceptibilidade é, por sua vez, determinada pela medida do momento magnético induzido por um campo magnético de fraca intensidade.

A lei de Curie só é válida desde que o sal seja «ideal», ou seja, desde que a temperatura seja tal que as interacções entre os spin ou entre estes e o campo do cristal sejam desprezáveis. Infelizmente, as temperaturas finais atingidas numa experiência de desmagnetização não preenchem, em geral, este requisito e, por consequência, o valor obtido para T não coincide com a temperatura

absoluta, chamando-se-lhe, por isso, temperatura magnética,  $T^*$ , dada, por

$$T^* = \frac{C}{X} \quad (3.9)$$

É, no entanto, possível correlacionar  $T^*$  com T.

## 4 — A ESCALA PRÁTICA INTERNACIONAL DE TEMPERATURA

Não se deseja concluir sem se dedicar umas linhas à chamada Escala Prática Internacional de Temperatura, ou, abreviadamente, IPTS (International Practical Temperature Scale). Contrariamente ao que se poderá julgar, a IPTS não é uma escala no sentido estrito do termo. A sua ideia basilar é a de providenciar um conjunto (ou uma «escala») de temperaturas, bem definidas, que possam ser utilizadas na calibração de instrumentos científicos e industriais. A estas recomendações adicionam-se outras regras, com o objectivo de universalizar métodos e procedimentos de medida da temperatura.

A primeira versão da IPTS apareceu na Sétima Conferência Geral de Pesos e Medidas, em 1927, e foi posteriormente refinada em 1948 (IPTS-48) e em 1968 (IPTS-68). Apresentam-se, em seguida, alguns dos princípios básicos, símbolos e nomenclatura da IPTS-68, parte dos quais foram já referidos ao longo deste artigo.

- a) A temperatura básica é a temperatura termodinâmica absoluta, à qual é dado o símbolo T.
- b) A unidade de temperatura nesta escala termodinâmica absoluta é o Kelvin, ao qual é dado o símbolo K.
- c) O tamanho do Kelvin é fixado definindo a temperatura do ponto triplo da água como 273.16 K, exactamente: 1 Kelvin = 1/273.16 K exactamente.
- d) Na escala termodinâmica absoluta deve escrever-se, por exemplo, 300 K e não 300° K.
- e) As temperaturas na escala Celsius (antigamente chamada Centígrada) são representadas pelo símbolo t.
- f) A unidade de temperatura na escala de Celsius é o grau Celsius, ao qual é dado o símbolo °C.
- g) 1 grau Celsius = 1 K exactamente.
- h) As temperaturas na escala de Celsius estão relacionadas com as temperaturas na escala Kelvin através da relação

$$t = T - 273.15 \text{ exactamente}$$

Pelas alíneas c), g) e h) conclui-se que a temperatura do ponto triplo da água é 0.01°C (exactamente).

Na Tabela 4.1 mostram-se os chamados «pontos fixos primários» da IPTS-68. Como se disse, essas temperaturas são usadas na calibração de termómetros. Existem ainda os «pontos fixos secundários», listados com o mesmo objectivo. Um deles é o ponto de fusão do gelo, 273.1500 ± 0.0001 K.

A IPTS-68, após estabelecer o conjunto de pontos fixos, especifica os sistemas termométricos que devem ser usados (ou seja, as características dos termómetros) consoante a temperatura que se pretende medir. De forma sucinta, são eles:

- 1) De 14 a 904 K, o termómetro de resistência de platina.

- 2) De 904 a 1338 K o termopar com condutores respectivamente de platina e de uma liga com 90% de Pt e 10% de Rh.
- 3) Acima de 1338 K o pirómetro óptico, usando da equação de Planck.

Tabela 4.1 — Pontos Fixos Primários da IPTS-68

Substância	Equilíbrio	T/K	Incerteza/K
Hidrogénio	s — l — g	13.810	± 0.010
Hidrogénio	l — g, a 25/76 atm	17.042	± 0.010
Hidrogénio	l — g, a 1 atm	20.280	± 0.010
Neon	l — g, a 1 atm	27.102	± 0.010
Oxigénio	s — l — g	54.361	± 0.010
Oxigénio	l — g, a 1 atm	90.188	± 0.010
Água	s — l — g	<b>273.16</b>	exacto
Água	l — g, a 1 atm	373.150	± 0.005
Estanho	s — g, a 1 atm	505.118	± 0.015
Zinco	s — l, a 1 atm	692.73	± 0.03
Prata	s — l, a 1 atm	1235.08	± 0.20
Ouro	s — l, a 1 atm	1337.58	± 0.20

## BIBLIOGRAFIA

A discussão do significado físico de temperatura pode ser encontrado, com desenvolvimento bastante variável, em livros de Termodinâmica, de Mecânica Estatística, de Química-Física, etc. Citam-se apenas, como exemplo,

- [1] W. J. MOORE, «Physical-Chemistry» (5<sup>th</sup> ed.), Longman, London, 1975.
- [2] A. SOMMERFELD, «Thermodynamics and Statistical Mechanics», Academic Press, New York, 1955.
- [3] K. DENBIGH, «The Principles of Chemical Equilibrium», (3<sup>rd</sup> ed.), Cambridge Un. Press, London, 1971.

Aconselha-se também a leitura de dois artigos, um deles editado em Portugal, há já alguns anos, sobre o conceito de temperatura, e, o outro, mais recente, relacionando temperatura com o Princípio Zero:

- [4] T. ISNARDI, *Ciência*, Vol. II, n.º 13,9 (1956).
- [5] B. BERGTHORSSON, *Am. J. Phys.*, **45**, 270 (1977).

O problema das temperaturas absolutas negativas está um pouco mais desenvolvido em

- [6] M. W. ZEMANSKY, «Temperatures Very Low and Very High», Van Nostrand Reinhold Co., New York, 1964., obra que contém igualmente informações sobre escalas de temperatura e métodos de medida. Estes assuntos são ainda tratados em
  - [7] J. A. HALL, «The Measurement of Temperature», Science Paperbacks, London, 1966.
  - [8] K. MENDELSSOHN, «Cryophysics», Interscience Pub., New York, 1960.
  - [9] E. FERMI, «Thermodynamics», Dover Pub., New York, 1956.
  - [10] J. M. STURTEVANT, «Technique of Organic Chemistry» (A. Weissberger, editor), Vol. I, Chapter VI, Interscience Pub., New York, 1965.
- Sublinhe-se que [8] trata especialmente da medida de baixas temperaturas e [9] dá um relativo desenvolvimento à escala Kelvin.
- Finalmente, para informações mais detalhadas acerca da IPTS veja-se, por exemplo,
- [11] F. D. ROSSINI, «Experimental Chemical Thermodynamics» Vol. I (S. Sunner and M. Mansson editors), Chapter 1, Pergamon Press, London, 1979. e refs. aí citadas.

## ADENDA

Dado que, por lapso, na publicação neste boletim (n.º 1, p. 14 e n.º 2, p. 15-19, da série II, 1979) do artigo intitulado «Nomenclatura de Hidretos de Nitrogénio e de Catiões, Aniões e Ligandos Derivados», da autoria de Armando J. L. O. Pombeiro, não foram incluídos a bibliografia (nota\*\* da página 14) nem os agradecimentos, são agora apresentados estes pontos:

\*\* J. O. Cabral, *Anais da Faculdade de Ciências do Porto*, Tomo XLIV, 1962.

C. M. Pulido, F. C. Barreira, R. S. Leal, J. J. R. Fraústo da Silva e M. I. V. Soares, *Rev. Port. Quim.*, 1965, **7**, 32.

### — Agradecimentos:

O presente autor agradece ao Professor J. Chatt o apoio prestado e aos Professores J.O. Cabral e A. R. Dias a leitura do manuscrito e as sugestões apresentadas.

Aproveita-se ainda a oportunidade para referir que todos os cometários às regras mencionadas poderão ser dirigidos quer directamente ao DR. D. M. P. Mingos quer ao Dr. A. J. L. Pombeiro.

# CONGRESSOS E CONFERÊNCIAS NO ESTRANGEIRO



coordenação  
de M. Regina Tavares

## Novos anúncios complementares aos anteriores

<b>1980</b>					
<b>Maio</b>					
5 - 7	Paris (França)	14 <sup>th</sup> International Symposium on Atmospheric Pollution	14-15	Llandudno or Mid Wales (G. B.)	C. S. Summer Meeting
12-16	Adelaide (Austrália)	50 <sup>th</sup> Congress of the Australian and New Zealand Association for the Advancement of Science	19-20	Frankfurt (R.F.A.)	Annual Meeting of Dechema
12-14	Utreque (Holanda)	Management of Technology Exchange	15-20	Madison (Wisc., USA)	3 <sup>rd</sup> IUPAC Symposium on Organic Synthesis
13-16	Utreque (Holanda)	Tech-transfair 80	23-27	Toronto (Canada)	10 <sup>th</sup> International Conference on Water Pollution Research
19-23	Rodez (França)	4 <sup>th</sup> EUACHEM Conference: «Organic and Organometallic Chemistry»	23-27	Birmingham (G. B.)	EUROCHEM 80 — Conference and Exhibition
20-24	Noordwijkerhout (Holanda)	1 <sup>st</sup> FECHEM Conference on Heterocycles in Bio-Organic chemistry	23-28	Jerusalem (Israel)	6 <sup>th</sup> International Conference on the Origin of Life
27-30	Lago Balaton (Hungria)	4 <sup>th</sup> Symposium on Ion Exchange (FECS)	30-1/7	Tóquio (Japão)	3 <sup>rd</sup> World Hydrogen Energy Conference
27-30	Hamburgo (R.F.A.)	2 <sup>nd</sup> Joint Conference «Conserving our Resources — The contribution of Chemical Technology»	30-4/7	Cannes (França)	13 <sup>e</sup> Symposium International de Chromatographie
28-30	Dortmund (R.F.A.)	10 <sup>th</sup> Annual Symposium on the Analytical Chemistry of Pollutants	30-4/7	Cambridge (G. B.)	— Lactam Antibiotics (2 <sup>nd</sup> International Meeting)
<b>Junho</b>			<b>Julho</b>		
3- 5	Gent (Bélgica)	4 <sup>th</sup> International P.R.P. — Automation Meeting	2- 4	Basileia (Suíça)	Symposium on Macrocyclic Ligands
2- 6	Florença (Itália)	5 <sup>th</sup> International Symposium on Solute-Solute-Solvent Interaction	6- 9	Montreal (Canada)	2 <sup>nd</sup> International Symposium on Drying
2- 6	Nápoles (Itália)	5 <sup>th</sup> International Conference on Zeolites (IUPAC)	6-12	Bayreuth (R.F.A.)	6 <sup>th</sup> International Conference on Thermal Analysis
3- 5	Amesterdão (Holanda)	Symposium on Particle Technology	7-11	Sydney (Austrália)	10 <sup>th</sup> International Symposium on Carbohydrate Chemistry
8-13	Amesterdão (Holanda)	15 <sup>th</sup> Fatipecc Congress	7-11	Toulouse (França)	International Conference on Coordination Chemistry
9-13	Strasbourg (França)	International Urethane Conference	10-11	Oxford (G. B.)	Bioelectrochemistry
10-13	Berlim (R.F.A.)	International Conference on «The Analysis of Non-Metals in Metals»	10-11	Leeds (G. B.)	Structure and Dynamics in Dispersions of Interacting Colloidal Particles
11-13	Cleveland, Ohio (U.S.A.)	International Symposium on the Statistical Mechanics of Phase Transitions in Polymers	13-19	Seefeld (Áustria)	8 <sup>th</sup> IUPAC Symposium on Photochemistry

Julho			1- 5	Varsóvia	5th Conference on Analytical che-
14-17	Swansea (G. B.)	International Symposium «Metallo- -Organic in Organic Synthesis»		(Polónia)	mistry (IUPAC)
21-25	St-Andrew (G. B.)	International Symposium «Stereo- electronic Effects in Organic Che- mistry»	1- 6	Cracóvia (Polónia)	9th International Symposium on the Reactivity of Solids
20-25	Strasbourg (França)	8th International Congress on Pho- tobiology	2- 5	Madrid (Espanha)	VII Symposium International de Chimie Thérapeutique
20-26	London (Ont., Canada)	6th International Fermentation Symposium	2- 6	Oxford (G. B.)	Meeting to form part of MOLEC III. The Third European Study Confe- rence on Molecular Low Energy
20-26	Univ. of Lancaster (G. B.)	SAC 80 — International Confe- rence on Analytical Chemistry (IUPAC)	2- 5	Héviz (Hungria)	CHEMPLANT 80 — Symposium of the Working Party on Routine Cal- culations and use of Computers in Chemical Engineering
21-25	Dortmund (R.F.A.)	3rd International Conference on Or- ganometallic and Coordination Chemistry of Germanium, Tin and Lead (FECS)	3- 5	Liverpool (G. B.)	Conférence européenne sur les me- canismes de polymérisation
28-1/8	Nairobi (Quênia)	First International Chemistry Conference in Africa: «Chemistry in the Development and Environment of Africa»	3- 5	The Univer- sity, Liverpool (G. B.)	Macromolecular Meeting
—	Heriot-Watt University, Edinburg (G. B.)	21st Meeting of the Mossbauer Spectroscopy Discussion Group	6-1 2	Liège (Bélgica)	ISEC '80 — International Solvent Extraction Conference
Agosto			7-11	Sheffield (G. B.)	International Conference on Coal as a Feedstock for the Chemical Industry
10-15	Cleveland (Ohio, USA)	III <sup>e</sup> Symposium International sur le PVC	7-12	Florença (Itália)	IUPAC International Symposium on Macromolecules
17-22	Santa Cruz (Ca., USA)	5th IUPAC Conference on Phy- sical Organic Chemistry	8-10	Oxford (G. B.)	General Discussion of Photoelec- trochemistry
17-22	Brighton (G. B.)	6th International Histochemistry and Cytochemistry Congress	8-12	Munich (R.F.A.)	11th World Energy Conference
18-22	Brighton (G. B.)	MICRO — 80	10-16	Moscovo (U.R.S.S.)	6 <sup>e</sup> Conférence internationale sur la croissance des cristaux
18-22	Leeds (G. B.)	International Conference on the Physics of Transition Metals	15-16	Trinity Hall, Cambridge (G. B.)	The Physical Chemistry of Micro- emulsions
24-29	San Fran- cisco (Ca., USA)	2nd Chemical Congress of the North American Continent	15-17	Nothingham (G. B.)	Symposium «Achieving Success in International Projects»
24-29	Boulder (Col., USA)	Symposium on Ozone	15-18	The Univer- sity, Birmingham (G. B.)	2nd BOC Priestley Conference
24-29	Jerusalem (Israel)	13th Meeting of the Federation of European Biochemical Societies	15-19	Basileia (Suíça)	3rd International Symposium on Loss Prevention and Safety Promo- tion in the Process Industry
25-29	Praga (Checosl.)	Congrès de Polarographie (Memo- rial J. Heyrowsky)	15-19	Pádua (Itália)	7th European Sympósium on Fluor- ine Chemistry
25-30	Graz (Áustria)	8th International Microchemical Symposium «Nature, Aim and Me- thods of Microchemistry»	15-19	Ferrara (Itália)	5 <sup>e</sup> Symposium européen sur les in- hibiteurs de corrosion
26-29	Merseburg (R.D.A.)	6th International Conference on Thermodynamic	15-20	Karlovy Vary (Checosl.)	7th Discussion Conference on Poly- mer Network (IUPAC)
26-29	Paris (França)	3 <sup>e</sup> Conférence Internationale sur les Matériaux Composites	16-18	Edimburgo (G. B.)	Conférence: «Non Aqueous Colloi- dal Dispersion»
Setembro			17-21	Canterbury (G. B.)	3rd Europhysics topical conference on Lattice Defects in Ionic Crystals
1- 3	Dusseldorf (R.F.A.)	2nd International Symposium on Homogeneous Catalysis (FECS)	16-19	Bruxelas (Bélgica)	3rd International Symposium on Marine Natural Products
			21-27	Tenerife (Espanha)	12th IUPAC International Sympo- sium on the Chemistry of Natural Products

18-19	Bruges (Bélgica)	Recent developments in filtermedia and their applications	<b>1981</b> <b>Março</b>		
23-24	Loughborough University of Technology (G. B.)	Fundamentals of Electroplating and Metal Finishing	10-13	Birmingham (G. B.)	POWECH Conference 81 (Symposium)
			29-3/4	Atlanta/Georgia (USA)	ACS Spring-Meeting (Mass Transfer with Chemical Reaction in Two-Phase Systems)
22-25	University College, Cardiff (G. B.)	C. S. Autumn Meeting: The Role of Electrons in the Study of solids	30-3/4	The University, Nottingham (G. B.)	E S R
22-25	Veneza (Itália)	11 <sup>th</sup> Congress on Cosmetic Research and Technology	28-4/4	Edimburgo (Escócia)	14 <sup>th</sup> FEBS MEETING
22-26	Cannes (França)	8 <sup>th</sup> International Vacuum Congress 4 <sup>th</sup> International Conference on Solid Surfaces	30-5/4	Berlim (R.F.A.)	Wasser Berlin 81
22-26	Karlovy Vary (Checosl.)	21 <sup>st</sup> Prague Microsymposium on Ring-Opening Polymerization of Heterocycles (IUPAC)	Spring	University of Bristol (G. B.)	General Discussion: Very High Resolution Molecular Spectroscopy
22-26	França	European Conference on Chemical Pathways in the Environment. (FECS)	<b>Abril</b> 7- 9	The University, Surrey (G. B.)	Annual Chemical Congress
23-25	Londres (G. B.)	1 <sup>ère</sup> Conférence Internationale sur la Surveillance en ligne et le contrôle de sécurité des ateliers — ICOSM 80	13-15	Heriot-Watt University, Edimburgo (G. B.)	Spring Meeting
23-27	Amesterdão (Holanda)	7 <sup>th</sup> International Symposium «Fresh Water from the Sea»	<b>Mai</b>		
30-3/10	Grasse (França)	8 <sup>e</sup> Congrès International des Huiles essentielles	6- 8	Nuremberga (R.F.A.)	3 <sup>rd</sup> International Symposium Agglomeration (F.E.G.C.)
<b>Outubro</b>					
1- 3	Strasbourg (França)	Jahrestreffen 1980 der Verfahrens Ingenieure	24-28	Basileia (Suíça)	18 <sup>e</sup> Didactica (foire internationale du matériel didactique)
1- 3	Sevilha (Espanha)	VII Convención de la Industria Química	25-27	Groningen (Holanda)	Relations between homogeneous and heterogenous catalysis
13-17	Amesterdão (Holanda)	2 <sup>nd</sup> International Conference of Scientific Editors	<b>Julho</b> 5-10	Israel (Jerusalem)	4 <sup>th</sup> International Conference on Surface and Colloid Science
13-17	Bournemouth (G. B.)	International Conference on Water Chemistry of Nuclear Reactor Systems	6- 9	Strasbourg (França)	27 <sup>th</sup> International Symposium on Macromolecules (IUPAC)
19-22	Edmonton, Alberta (Canada)	30 <sup>th</sup> Canadian Chemical Engineering Conference	12-17	Exeter (G. B.)	5 <sup>th</sup> International Meeting on NMR Spectroscopy
29	York (G. B.)	Symposium: Modern Radiochemical Practice	19-24	Bristol (G. B.)	International Conference on the Chemistry of Platinum Group Metals
<b>Dezembro</b>					
16-17	University of Sussex, Brighton (G. B.)	Symposium: Chromatography, Equilibria and Kinetics	20-23	Oxford (G. B.)	7 <sup>th</sup> International Symposium on Synthesis of Organic Chemistry
18-19	York (G. B.)	Nitrogen and Sulphur Cycles in Biology	<b>Agosto</b> 16-22	Vancouver (Canadá)	28 <sup>th</sup> Congress International Union of Pure and Applied Chemistry
19-20	York (G. B.)	12 <sup>th</sup> Meeting of the Inorganic Reaction Mechanisms Group	23-28	New York City (USA)	ACS Fall meeting
			23-28	Helsínquia (Finlândia)	EUROANALYSIS IV (FECS)
			30-4/9	Jerusalem (Israel)	4 <sup>th</sup> International Symposium on Chemistry of Nonbenzoid aromatic compounds (IUPAC)

30-5/9	Viena (Áustria)	XI International Congress of Clinical Chemistry	14-16	University of Nottingham (G. B.)	General Discussion: Selectivity in Heterogeneous Catalysis
31-4/8	Praga (Checosl.)	7th Congress CHISA			
<b>Setembro</b>					
6-11	Mainz	8th International Congress on metallic corrosion — 7th Congress of the European Federation of Corrosion	28-30	Budapeste (Hungria)	VIIIth Symposium Industrial Crystallization
<b>Outubro</b>					
7-10	University College of North Wales, Bangor (G. B.)	Structure and Reactivity of Carbocations	4-9 4-9	Montreal (Canadá)	2nd World Congress on Chemical Engineering and World Chemical Exposition

# CONFERÊNCIA INTERNACIONAL SOBRE EDUCAÇÃO EM QUÍMICA

Dublin, 27-31 de Agosto de 79

**Tema: O ensino da Química — Intervenção entre os níveis secundário e terciário**

A Dublin, cidade dos congressos, deslocaram-se cerca de 400 professores dos ensinos secundário e terciário provenientes de 57 países para participarem numa conferência internacional cujo tema foi 'O ensino da Química — intervenção entre os níveis secundário e terciário'.

Em cada dia da conferência houve um assunto principal apresentado sob dois pontos de vista, o do ensino secundário e o do ensino terciário. Seguidamente, em grupos de cerca de 20 participantes, discutia-se o assunto do dia, durante o resto da manhã, e as conclusões destas discussões foram apresentadas no fim do dia em sessão plenária. Além disso, os assuntos focados em algumas das conferências plenárias foram discutidos numa base regional (África, Ásia, Europa de expressão francesa, resto da Europa, continente norte-americano, continente sul-americano).

A conferência foi ainda preenchida com três sessões de posters em 3 tardes, nas quais foram expostos cerca de 90 posters.

## 1 — Que química precisam os químicos e os cidadãos (em geral)?

O Dr. Stig Anderson, director da Katedraeskola em Lund, na Suécia, considera que actualmente uma pessoa culta deve ter um conhecimento de ciências, incluindo conhecimentos de Química. Apesar disto, nota-se nos últimos anos, em muitos países, que o interesse dos alunos por estudos de Química diminuiu.

O conferencista considera essencial, para que o ensino da química seja estimulante para os alunos e lhes proporcione conhecimentos do assunto o seguinte:

- a) o currículo deve estar orientado para as experiências dos próprios alunos e para as aplicações da química na vida diária e na tecnologia;
- b) o currículo deve ter uma construção lógica;
- c) as experiências feitas pelos alunos e as demonstrações feitas pelos professores não devem ser apenas experiências com tubos de ensaio;
- d) deve referir-se o desenvolvimento contínuo das ciências em termos de novas teorias (modelos).

O conferencista considera que é desejável que no currículo de todos os alunos se inclua química pois qualquer cidadão (nomeadamente os políticos), terá que tomar decisões no campo da energia ou do ambiente, e jornalistas e repórteres informarão o público acerca destes assuntos.

O Professor David Brown, de University College, em Dublin, sugeriu que apesar das actuais pressões sociais e políticas deve manter-se como peça essencial de um curso universitário o desenvolvimento lógico e a inter-relação entre a teoria e a experiência; contudo, estes princípios devem aplicar-se a um certo número de áreas (energia, ambiente, entre outras), em que se evidencie não só a inter-relação anteriormente referida mas também a relação entre as disciplinas académicas e os desenvolvimentos industriais que provaram ter importância social e económica. Este ponto de vista tem estado a ser aplicado no ensino secundário por um grupo de trabalho do Instituto de Química da Irlanda que está a planear uma estrutura e um curso em que se proporcione não só a compreensão dos conhecimentos de química, mas também das aplicações da química.

Nos grupos de trabalho discutiram-se duas questões: Que química se deve ensinar e que se deve fazer no futuro para os alunos que pensam prosseguir estudos de química, e para os outros alunos. A sessão plenária foi presidida pela Professora Marjorie Gardner, da Universidade de Maryland em Washington, USA.

## 2 — Que equilíbrio deve existir entre facto e teoria no currículo?

O Director de Riccarton Nigh Sechool, na Nova Zelândia, Terry Hitchings, referiu-se aos programas existentes no ensino secundário que são determinados pelas universidades e limitados pelos exames. Como estes programas têm muitos princípios abstractos, a química descritiva tem sido ensinada de um modo inadequado. O dilema facto-teoria tem sido delimitada pela experiência.

Do ponto de vista dos alunos os factos podem constituir um estímulo; estes devem ser examinados à luz de teorias após o que se devem procurar aplicações. Mas a inclusão de factos que ilustram a teoria de um modo perfeito faz com que os alunos fiquem demasiados confiantes.

Para se encontrar um equilíbrio entre facto e teoria deve considerar-se a quem se destina o

currículo, procurando-se identificar os problemas dos alunos. O currículo deve ser orientado primeiro para a observação dos factos e depois para a exposição da teoria (explicação) tendo em atenção que observações simples devem estar ligadas a explicações simples.

O Professor J. Padilla, da Universidade Autónoma do México, disse que aceita como necessário que o ensino da química seja baseado em trabalho laboratorial. No México o ensino prático da química está limitado por factores, como a pressão causada pelo aumento de população, e a falta de materiais e elementos humanos com qualificações adequadas. A falta de metodologia que permita determinar e justificar o conteúdo experimental de um curso faz com se copie o que se produz no estrangeiro. Na Escola de Química da Universidade do México procuraram-se outras alternativas tendo-se criado um curso básico de laboratório, com um resultado positivo, após alguns anos de esforço contínuo. Embora nem tudo o que se planeou tenha resultado a criação deste curso mostrou que não há soluções simples mas apenas escolhas inteligentes.

Nos grupos de trabalho discutiram-se duas questões:

- como estabelecer uma melhor interacção facto-teoria em cursos de química?
- até que ponto devem os cursos de química estar relacionados com processos (capacidades e atitudes)?

A sessão plenária foi presidida por Valerie Hewett, da Escola de Educação da Universidade de West Indies na Jamaica.

3 — No 3.º dia de trabalhos realizaram-se duas sessões paralelas

## Equilíbrio químico e Energética

O Professor G. Teterin, da Universidade de Odessa, URRS, mencionou a existência de alguns problemas que surgem aos alunos no estudo do equilíbrio químico. Por exemplo, no estudo do princípio de Le Châtelier os alunos visualizam a existência de dois compartimentos e pensam no que acontece em cada compartimento. No estudo de catalizadores os alunos pensam que estes conduzem a reacção numa determinada direcção. Em face disto o professor necessita ter uma lista de problemas que os alunos manifestam.

O conferencista considera que nos novos currículos deve introduzir-se termodinâmica, pois ensinar química com elementos de termodinâmica é ensinar química moderna.

A Doutora Nida Sopianchai, Directora do Instituto para a Promoção do Ensino da Ciência e da Tecnologia (IPECT), em Bangkok, Tailândia, iniciou a conferência pondo as questões: porquê ensinar química?, que química ensinar?, por que ordem se deve ensinar química?. Indicou objectivos para o ensino da ciência, critério para a selecção de conteúdos e características do currí-

culo de química ensinado no IPECT. Seguidamente discutiu os problemas do ensino da energética no curso secundário pois, ao misturar substâncias, verifica-se que:

- umas vezes ocorre reacção, outras não;
- umas vezes há libertação de calor, outras vezes há absorção de calor;
- algumas reacções dão-se por completo, outras não;
- umas reacções são rápidas, outras são lentas.

Considera a conferencista que no ensino secundário não se deve falar em entalpia de reacção, embora se possa usar a designação  $\Delta H$ . Quanto à Lei de Hess pode ser apresentada de um ponto de vista matemático e, se possível, confirmada no laboratório.

Concluiu a conferência referindo-se à necessidade de investigação na área do ensino da energética e do equilíbrio químico.

Nos grupos de trabalho discutiu-se a questão: na interface entre a educação no secundário e no terciário ao ensinar-se equilíbrio deve introduzir-se as noções de entalpia, energia livre, entropia? Presidiu à sessão plenária o Professor D. Vitoric, da Universidade de Belgrado na Jugoslávia.

### Estrutura e Ligação química

Joseph Chester, de Colaiste Choilim, na Irlanda, sugeriu que as críticas ao ensino dos conceitos de ligação química no ensino secundário são devidas mais às estratégias de ensino adoptadas e não tanto a dificuldades inerentes ao assunto.

O Professor Henry Bent, da Universidade de North Carolina, Raleigh, USA, baseou a sua conferência em dois pontos: ligações covalentes que o átomo de carbono forma e algumas regras de química estrutural.

A sessão plenária foi presidida pelo Doutor N. Fitzpartick, de University College, Duolin.

### 4 — Como educar professores de química

O Doutor Sam Bajah do Instituto de Educação da Universidade de Ibadam, na Nigéria, referiu-se à preparação de professores de química para o nível secundário que deixou de estar orientada apenas para cursos convencionais de química para estar orientada para as relações preponderantes da química com a sociedade e com o meio. A procura da química pura como uma base académica para várias profissões foi suplantada pela procura da química para todos — química que dê a oportunidade de desenvolvimento do homem na sua totalidade. A química é considerada como um veículo para trazer paz e estabilidade para a humanidade. Em resultado disto, a educação de professores de química tem que ter uma visão mais alargada.

Os professores de química devem ter uma boa preparação académica e devem melhorá-la pois não ensinam apenas o que sabem. A preparação de professores não deve ser feita para classes ideais, pequenas, mas os professores devem ser preparados para ensinar química a classes grandes, entusiásticas, já que em muitos países em desenvolvimento a frequência escolar tende a aumentar.

O Professor Maurice Gommel, da Universidade de Poitiers, França, seleccionou como objectivo principal da sua conferência: a química pode ser a matemática de amanhã. O conferencista considera que se deve ensinar química realçando as suas dimensões culturais, e deve dar-se aos alunos a possibilidade de descobrirem as relações entre os vários aspectos da realidade. Deste modo a química pode vir a ser a matemática de amanhã.

As questões postas aos grupos de trabalho foram em maior número que nas sessões anteriores:

- 1 — Como se deve processar a preparação dos professores de química, atendendo ao conteúdo académico, capacidades pedagógicas e encorajamento de uma atitude positiva?
- 2 — Quais devem ser as finalidades e funções de estágio e de reciclagem?
- 3 — Como preparamos os professores para se adaptarem ao que existe e serem inovadores?
- 4 — Atendendo a que não há muitos problemas devidos ao conteúdo, finalidades e necessidades dos diversos países, qual é o programa comum da preparação de professores de química?

No entanto, não foi possível fazer-se a discussão de mais que uma ou duas das questões formuladas. Algumas das conclusões foram:

- os professores devem ser pessoas abertas que saibam ouvir os alunos e identificar problemas de aprendizagem;
- os professores universitários devem ter, pelo menos, a mesma preparação pedagógica que os professores do ensino secundário;
- a preparação pedagógica deve vir depois da preparação académica;
- os professores devem utilizar vários métodos de ensino;
- o sucesso do ensino é proporcional ao grau de envolvimento do aluno;
- os professores devem trabalhar no equilíbrio Ensino  $\longleftrightarrow$  Investigação.

A sessão foi presidida pelo Doutor Ram Kul-karni, de Shroff Research Institute em Bombaim.

### Sessões de posters

Nas sessões de posters os temas e métodos utilizados foram muito variados, desde a simples apresentação de 'papers' expostos no placard, até aos que utilizaram videotape. Os participantes aproveitaram a oportunidade de falar com os autores dos posters apresentados para poderem esclarecer algum ponto do assunto que lhes interessaram.

### Sessão de encerramento

Ao fim de quatro dias de trabalho a conferência terminou. Antes, porém, foi anunciada a data e o local da próxima conferência internacional: Universidade de Maryland, em Washington, USA, em Agosto de 1981:

MARIANA P. PEREIRA  
(Liceu de Queluz)

---

(\*) Atendendo a que há muitos problemas devidos ao conteúdo, finalidades e necessidades dos diversos países, qual é o programa comum da preparação de professores de química?

---

## ACTIVIDADES DA S.P.Q.

---

### Reunião Internacional de Presidentes de Sociedades de Química

---

Realizou-se em Washington, entre 15 e 17 de Setembro passado, a 7.<sup>a</sup> Reunião Internacional de Presidentes de Sociedades de Química.

Em 1967 o Doutor C. Overberger, então presidente da American Chemical Society (ACS) convidou os presidentes de Sociedades de Química de outros países para discutirem, em Washington, assuntos de interesse comum das Sociedades. Nove países se fizeram representar no que constituiu a primeira dessas reuniões, pois foi tal o seu êxito que foi decidido prosseguir com reuniões desse tipo de dois em dois anos. As reuniões que se seguiram foram todas na Europa Ocidental, sendo a última de novo em Washington, e a próxima prevista para realizar-se na Jugoslávia.

De ano para ano se tem vindo a notar um maior número de adesões de novos países. Na reunião que se realizou em Setembro passado, e em que a SPQ se fez representar pela primeira vez, participaram representantes de Sociedades de Química de 36 países espalhados por todos os Continentes.

A reunião teve lugar na excelente sede da ACS e concentrou as suas actividades em dois dias e meio, com uma agenda de trabalhos extremamente compacta mas que, dada a eficiência da organização, foi possível cumprir integralmente.

Os temas tratados foram muitos e variados sendo apresentados quer individualmente quer sob a forma de mesas-redondas. Uma característica de todas as sessões foi o tempo dedicado à discussão ser sempre ampla, permitindo a aprecia-

ção dos diferentes pontos de vista e de opinião. As discussões foram sempre amplas, permitindo a apreciação de problemas tratados sob o ponto de vista da atualidade. Citei, entre outros, a cooperação das Sociedades de Química na criação de centros de investigação em assuntos especializados nos países em desenvolvimento, o papel das Sociedades de Química na transferência de tecnologia entre as nações, mais concretamente dos países mais desenvolvidos para os países menos desenvolvidos, o papel da Química na obtenção de novas formas de energia, diversos aspectos ligados ao problema do ensino da química e da reciclagem de professores, e as relações entre as universidades e a indústria. Futuramente serão dadas notícias mais pormenorizadas relativas a alguns desses temas.

Um assunto que suscitou certa controvérsia foi a perspectiva de formação de uma Sociedade Internacional de Química composta por membros individuais que vem sendo defendida há algum tempo por alguns químicos americanos. Dada a delicadeza e importância do assunto pelas repercussões que pode vir a ter no funcionamento de

sociedades nacionais, pelo desconhecimento de como poderá vir a estabelecer relações com a IUPAC e, genericamente do modo como poderá vir a funcionar, foi decidido designar um grupo de trabalho constituído por nove dos presentes, o qual não tendo poder decisório, estudará o problema nos seus múltiplos aspectos, de modo a ser possível tomar uma decisão possivelmente na próxima reunião de presidentes de Sociedades de Química a realizar em 1981.

Na sessão de encerramento foi oferecida a cada Sociedade representada uma réplica dum pergaminho entregue ao Rei da Suécia pelo Doutor Glen Seaborg, prémio Nobel, homenagem da ACS e Berzelius, comemorando a passagem do 2.º centenário do seu nascimento e assinalando a reunião dos Presidentes de Sociedades de Química em Washington.

Lisboa, Janeiro de 1980

M.A.A. Ferreira



Os Presidentes de Sociedades de Química reunidos em Washington

# DIVISÃO DE EDUCAÇÃO

## (Delegação do Porto)

ASSUNTO: Encontro de professores de química para a redacção de objectivos de comportamento.

Na sequência do encontro realizado no passado dia 29 de Fevereiro, a Divisão de Educação da S.P.Q. (Delegação do Porto) promove um novo encontro de professores de Química agora com a finalidade de os familiarizar com a redacção de objectivos de comportamento e criar um certo consenso sobre o assunto. Este encontro realizar-se-á no **dia 23 de Maio pelas 14,30 horas** e consistirá fundamentalmente na discussão e extracção de conclusões sobre um exercício cuja solução os participantes isoladamente ou em grupos no máximo de 3 pessoas, tenham enviado até ao dia 1 de Maio para apreciação da Divisão.

O número de inscrições será limitado e os participantes serão distribuídos em Grupos de discussão, havendo a terminar uma Sessão Plenária.

O título do encontro será:

### REDACÇÃO DE OBJECTIVOS

O orientador vai ser o Doutor Duarte Costa Pereira

B — A base de participação será o seguinte exercício de que os pontos a) e b) são considerados obrigatórios para a participação no encontro:

### CINÉTICA QUÍMICA

Dadas as metas gerais:

- 1 — Estudar os factores que influenciam a velocidade de reacção.
- 2 — Mostrar que o decurso duma reacção é muitas vezes complexo e que pode ter lugar em várias etapas.
- 3 — Introduzir um tratamento simples das teorias da velocidade de reacção.

- a) Procurar um conteúdo adequado (para o 10.º-11.º ano).
- b) Escrever os objectivos de comportamento adaptados ao conteúdo e objectivos gerais com indicação das condições e nível de execução realista para se adaptar ao 10.º-11.º ano.
- c) Classificar tais objectivos de acordo com a taxonomia de Blom.
- d) Considerar as discriminações, conceitos e princípios envolvidos e tentar estruturar entre eles uma hierarquia do tipo Gagné (ser um pré-requisito para a aprendizagem de).

C — A inscrição (75\$00 para os sócios e 150\$00 para não sócios) far-se-á até ao dia 1 de Maio de 1980 (vide Boletim de Inscrição anexo **FICHA X**, obrigatoriamente por cheque ou **vale do correio**, em envelope fechado que

inclua também a resposta ao exercício proposto (ou fotocópia) e os nomes dos outros participantes que contribuíram para essa solução.

**Não se aceitam inscrições entregues pessoalmente nem aquelas que vierem acompanhadas por notas ou moedas.**

À semelhança das realizações anteriores será pedida superiormente revelação das faltas aos professores participantes. Por isso no dia do Encontro deverá ser apresentada a **FICHA Y** para autenticação por um responsável da S.P.Q.

**Carlos M.M.S. Corrêa**  
Faculdade de Ciências do Porto

### FICHA X

**SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA (Porto)**  
Divisão de Educação

### Redacção de Objectivos de Comportamento

Boletim de Inscrição n.º \_\_\_\_\_ (a)

Nome \_\_\_\_\_

Endereço \_\_\_\_\_

Local de trabalho \_\_\_\_\_

Sócio da SPQ: **Sim**  **Não**

### FICHA Y

**SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA (Porto)**  
Divisão de Educação

Para os efeitos de revelação de faltas, declara-se que o \_\_\_\_\_

professor na Escola \_\_\_\_\_ esteve presente no encontro de professores realizado por esta Sociedade no dia 23 de Maio, das 14 às 20 horas.

Pel'A Sociedade Portuguesa de Química (Porto) (a)

RECIBO N.º \_\_\_\_\_ (a)

Recebemos do Sr. \_\_\_\_\_

a quantia de 75\$00/150\$00 relativa à participação no encontro de professores «Redacção de Objectivos de Comportamento».

Data \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_

Pel'A SPQ \_\_\_\_\_

(a) Só estes itens serão preenchidos pela SPQ tudo o resto deve ser preenchido pelo interessado.

### Assunto: EXPERIÊNCIAS DE SALÃO 80

Animada pelo êxito obtido em 1979 com a realização do 1.º encontro de professores de química para realizar experiências em Anfiteatro (Experiências de Salão) e com os mesmos objectivos de então, a Divisão de Educação da S.P.Q. (Porto) tenciona promover uma espécie de «Encontro Nacional para realizar Experiências de Salão», encontro este que teria uma extensa cobertura televisiva, cujas gravações em «videotape» poderiam posteriormente ser utilizadas em programas de natureza científica e pedagógica.

A realização de uma iniciativa deste tipo requer uma razoável preparação, muito especialmente no que se refere em conseguir uma variedade de pessoas que proponham e realizem as experiências, de modo a ser evitada a situação verificada no ano transacto.

Em face do exposto, a SPQ (Porto) vai promover primeiramente um **encontro preparatório** denominado

#### EXPERIÊNCIAS DE SALÃO 80

a realizar no Departamento de Química da Faculdade de Ciências do Porto no

**Dia 16 de Junho (2.ª-feira), às 14,30 horas**

e do qual sairão certamente algumas experiências para o encontro nacional.

#### Que experiências escolher?

Mantém-se o princípio estabelecido para o 1.º encontro:

«Mesmo que pense que a experiência que proporia é demasiado conhecida, não deixe de a propor porque haverá sempre algum colega que a não conhece, mesmo que as experiências pareçam muito vulgarizadas, poderão sempre dar origem a uma boa troca de impressões sobre o fenómeno e ter interesse para a origem a uma boa troca de impressões sobre o fenómeno e ter interesse para a inclusão numa futura publicação de compilação de experiências de sala de aula.

As experiências seleccionadas para exibição deverão:

- (1) Ter possibilidades de realização em sala de aula, sobre uma mesa ou secretária **desprovida** de água corrente (embora provida de gás e outras facilidades).
- (2) Não ultrapassar 10 minutos, incluindo possíveis explicações.
- (3) Utilizar equipamento pouco sofisticado; o ideal será incentivar a utilização de equipamento construído pelo próprio professor ou aluno.

Em caso de experiências semelhantes, será dada preferência às experiências propostas por professores do ensino secundário.

Todas as propostas de realização de experiências, se recebidas correctamente apresentadas, serão publicadas num folheto a distribuir no encontro».

A descrição das experiências deve ser enviada na **FICHA A** até ao dia **15 de Maio**.

Se não forem recebidas experiências de professores do ensino secundário em número suficiente, **o encontro ficará anulado**.

#### Inscrições (até ao dia 15 de Maio):

Sócios (c/quota de 1980) . . .	125\$00
Não sócios . . . . .	250\$00

Os sócios da SPQ têm prioridade sobre os não sócios.

**Não se aceitam inscrições entregues pessoalmente.**

A inscrição é feita mediante a **FICHA B** que deverá ser acompanhada de **vale de correio ou cheque** (não envie dinheiro — notas e moedas — dentro das cartas. Se o fizer, a sua inscrição será **ANULADA**), e enviada a

Divisão de Educação da S.P. de Química  
Faculdade de Ciências  
Praça Gomes Teixeira  
4000 PORTO

**Carlos M.M.S. Corrêa**  
Faculdade de Ciências do Porto

## FICHA A

1 — Título da experiência \_\_\_\_\_

2 — Proponentes \_\_\_\_\_

3 — Professores em (estabelecimentos de ensino) \_\_\_\_\_

4 — Objectivo da experiência \_\_\_\_\_

5 — Reagentes necessários para uma experiência (indicar quantidades):

Equipamento necessário:

6 — O equipamento/reagentes serão levados por nós: Sim  Não 

7 — Descrição e modo de proceder:

8 — Conclusões:

9 — Bibliografia:

10 — Preço dos reagentes (se possível):

Assinatura \_\_\_\_\_

Morada \_\_\_\_\_

Telefone (casa) \_\_\_\_\_ (Local de trabalho) \_\_\_\_\_

— Promovido pela Divisão de Educação da S.P.Q. — Zona Centro — e com o apoio do Departamento de Química da Universidade de Aveiro realizou-se, no dia 4 de Janeiro, um seminário experimental (trabalho de laboratório, avaliação de objectivos) para professores do ensino secundário sobre:

— Comportamento químico de metais de transição, em soluções aquosas.

Esta iniciativa será repetida no Departamento de Química da Universidade de Aveiro, para outros grupos de professores, em datas a anunciar oportunamente. Os interessados podem dirigir-se por carta a este Departamento.

## FICHA B

(Deve ser **totalmente** preenchida)

## EXPERIÊNCIAS DE SALÃO 80

Ficha de Inscrição n.º \_\_\_\_\_ (a)

Nome \_\_\_\_\_

Endereço \_\_\_\_\_

Estabelecimento de Ensino \_\_\_\_\_

Sócio da SPQ Sim  Não 

## DECLARAÇÃO

Para efeitos de relevação de faltas, declara-se que o Sr. \_\_\_\_\_ professor em (estabelecimento de ensino e localidade) \_\_\_\_\_

esteve presente no encontro destinado a professores de Química «EXPERIÊNCIAS DE SALÃO» realizado no dia 16 de Junho das 14 às 20 horas.

Pel'A Sociedade Portuguesa de Química (Z. Norte)

## RECIBO

N.º \_\_\_\_\_ (a)

Recebemos do Sr. \_\_\_\_\_

a quantia de 125\$00/250\$00 para inscrição no Encontro EXPERIÊNCIAS DE SALÃO 80

Data \_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_

Pel'A SPQ

(a) A preencher pela SPQ

# NOTICIÁRIO

## V REUNIÃO HISPANO-PORTUGUESA DE ADSORÇÃO

### 1 — Introdução

De acordo com a decisão tomada na IV Reunião celebrada em Sevilha, vai realizar-se em Lisboa a V Reunião dos Grupos de Investigação de Espanha e Portugal relacionados com a Adsorção. Escolheu-se para esta reunião a data de 24 de Setembro de 1980, tomando em consideração a realização da próxima Bienal da Real Sociedade Espanhola de Física e Química, em Burgos, de 29 de Setembro a 3 de Outubro.

No que respeita à organização deste Encontro, e aproveitando as sugestões das últimas Reuniões de Adsorção, procurar-se-á com antecedência agrupar as comunicações por temas, e sobre os mais representativos serão realizados debates, orientados por um coordenador. Além destes debates e de conferências plenárias, efectuar-se-ão ainda sessões de apresentação de comunicações. Prevê-se que cada Grupo de Investigação indique um representante para expor, em síntese, o conjunto de comunicações apresentado pelo grupo. Porém, **todos os resumos enviados dentro do prazo estabelecido serão publicados.**

Para que o Livro de Resumos possa ser editado a tempo de ser enviado aos participantes com a antecedência necessária, solicita-se o envio dos originais, executados de acordo com as normas em anexo, **até 20 de Maio de 1980.** Para efeitos de organização agradece-se que a ficha de inscrição junta seja preenchida e enviada na volta do correio.

Agradece-se a divulgação desta circular entre os eventuais interessados nesta reunião, e sendo necessário poderão usar-se fotocópias da ficha individual de inscrição.

Na 2.<sup>a</sup> Circular serão dadas informações mais detalhadas sobre os programas científico e social da Reunião.

### 2 — Comissão Organizadora

M. Manuela Brotas de Carvalho (Fac. Ciências de Lisboa) — Presidente.

José Luís C. C. Figueiredo (Fac. Eng. do Porto)

Carlos A. A. Bernardo (Univ. do Minho, Braga)

M. Regina Sales Grade (Centro de Quim. Fis. e Radioquímica, Lisboa)

M. Alice S. Conceição (Fac. Ciências de Lisboa)

M. João Rodrigues Pires (Gr. Estudos de Catálise, Inst. Sup. Tec., Lisboa)

### 3 — Correspondência

As fichas de inscrição e pedidos de informação deverão ser dirigidos para:

Prof. M. Manuela Brotas de Carvalho

Comissão Organizadora da V Reunião Hispano Portuguesa de Adsorção

Centro de Química Física e Radioquímica  
Faculdade de Ciências

1200 Lisboa

Telefone: Lisboa 608932

Os resumos das comunicações deverão ser enviados para:

Prof. Carlos A. A. Bernardo

Comissão Organizadora da V Reunião Hispano-Portuguesa de Adsorção

Centro de Química Pura e Aplicada

Universidade do Minho

4719 Braga Codex Portugal

Telefone: Braga 27007, 27008, 27009

### 4 — Alojamento

Dado que no mês de Setembro são previsíveis dificuldades na marcação de hotéis em Lisboa, recomenda-se que os participantes, se estiverem interessados que a Comissão Organizadora trate deste assunto o indiquem desde já na «Ficha Individual de Inscrição». Os preços mencionados **são apenas indicativos** e referem-se a quartos com casa de banho privativa e pequeno almoço. Poderá ser necessário alojar os participantes em quartos duplos.

#### Preços por dia

	Quarto simples	Quarto duplo
Hotel de 5 estrelas	3100\$00	4100\$00
Hotel de 4 estrelas	1400\$00	1950\$00
Hotel de 3 estrelas	950\$00	1250\$00

### 5 — Normas para a execução dos originais das comunicações

Os resumos das comunicações serão editados pela Reprografia da Universidade do Minho, pelo método de reprodução directa. Para garantir um bom aspecto gráfico é necessário que os auto-

res adoptem rigorosamente as normas seguintes:

(i) Os resumos não deverão ultrapassar três páginas, formato A4, incluindo tabelas e figuras.

(ii) O texto deverá ser escrito num rectângulo de 145 x 203 mm, tendo em atenção as margens indicadas, imediatamente abaixo da linha de referência.

(iii) Os originais deverão ser dactilografados em papel branco (tipo bond), com uma máquina eléctrica, com tipo de letra não inferior à elite, usando fita preta nova, de preferência de carbono.

(iv) Não devem fazer-se rasuras ou correcções, a fim de conseguir boa reprodução. No caso de pequenas correcções, recomenda-se o uso de líquidos adequados.

(v) O texto deve ser dactilografado a 2 espaços.

(vi) As figuras e esquemas devem ser desenhados a **tinta da China** no mesmo papel, com legendas dactilografadas.

(vii) As folhas devem ser numeradas a lápis fora do rectângulo.

(viii) Na 1.<sup>a</sup> página deve incluir-se pela ordem indicada e começando junto da margem esquerda: título em maiúsculas, nome(s) do(s) autore(s), nome e morada da instituição.

#### FICHA INDIVIDUAL DE INSCRIÇÃO

(Preencha em maiúsculas, por favor)

##### V Reunião Hispano-Portuguesa de Adorção

Lisboa, 24 a 27 de Setembro de 1980

- 1 — Nome .....
- 3 — Morada .....
- 4 — Telefone .....
- 5 — Apresentarei comunicação \* SIM  NÃO   
Título provisório .....
- 6 — Estou interessado que a Comissão Organizadora me reserve ..... quarto(s) simples/duplo(s)\*, nos dias ..... a ..... de Setembro, em Hotel de ..... estrelas.

\* Riscar o que não interessar.

Data .....

Assinatura .....

Destacar e enviar com urgência para M. Manuela Brotas de Carvalho, Comissão Organizadora da V Reunião Hispano-Portuguesa de Adorção.  
Centro de Química Física e Radioquímica  
Faculdade de Ciências — 1200 LISBOA

#### CONFERÊNCIA INTERNACIONAL SUBSIDIADA PELA IUPAC

##### «HARMONIZATION OF pH SCALE RECOMMENDATIONS»

18, 19, 20 de Junho 1980

Fundação Calouste Gulbenkian  
Av. Berna — **Lisboa**

Para informações complementares contactar:

Prof. M. FILOMENA CAMÕES

CECUL  
FAC. CIÊNCIAS  
1294 — LISBOA  
Tel. 60 88 23

## O QUE É A ASE?

A Association for Science Education (ASE) é uma instituição inglesa fundada em 1963 após a fusão de duas associações de professores existentes anteriormente e conta com mais de 15 000 associados agrupados por 17 regiões. Cada secção regional organiza um programa de actividades que decorre ao longo do ano. Para além de editar dois jornais — The School Science Review e Education in Science — a ASE publica vários folhetos sobre temas relacionados com o ensino das ciências.

Anualmente a ASE promove uma reunião de 4 dias numa universidade. O programa inclui palestras, simpósios, demonstrações, discussões de interesse científico e educacional, filmes científicos, bem como exibição de aparelhos científicos, auxiliares de ensino e livros de interesse científico. Os associados podem exibir aparelhos concebidos e construídos nas escolas que leccionam e apresentar trabalhos que tenham executado.

A 17.<sup>a</sup> reunião anual realizou-se de 2 a 5 de Janeiro de 1980 na Universidade de Hull. Uma das palestras que suscitou grande interesse foi a proferida pelo professor G. W. Gray do departamento de Química desta universidade, sobre Cristais líquidos. O interesse resultou, em parte, do facto do departamento de Química da Un. de Hull juntamente com duas outras instituições ter sido premiado em Abril de 1979 com o Queen's Award Technological Achievement pelo trabalho desenvolvido neste campo. As 28 palestras, cada uma de 1 1/2 h de duração versaram temas sobre Ciência e Democracia, Indústria, Sociedade e Educação, Micro-organismos — novas fontes alimentares, Lasers e suas aplicações, Soluções salinas em química inorgânica, entre outros.

Em 12 simpósios, cada um com a duração de 3 horas (com intervalo para café ou chá) debateram-se vários temas: Aplicação da psicologia ao ensino das ciências, Escola e Indústria, Segurança nas aulas de ciências, etc.

A exposição de trabalhos dos associados foi visitada com manifesto entusiasmo pelos professores presentes nesta reunião. Experiências de electrostática, Modelo da condução da corrente eléctrica em metais, Experiências com bolas de sabão, Material simples para preparação e estudo de propriedades de gases, Lasers nas escolas, Programas de Microcomputadores, Avaliação recorrendo a um banco de testes são alguns dos títulos dos trabalhos expostos nas bancadas, junto das quais os expositores prestaram esclarecimentos e responderam às questões que lhes foram postas pelos visitantes.

Teve também grande interesse a apresentação de trabalhos de investigação realizados em escolas secundárias por professores e alunos, sob o patrocínio de um comité apropriado. Os professores interessados submetem um plano da investigação que pretendem levar a cabo, que deve ser original e, de preferência, deve conter uma compo-

nente laboratorial. Após a aprovação do plano o comité nomeia um supervisor e adquire o equipamento necessário, que é fornecido em regime de empréstimo. Um dos objectivos do comité é encorajar alunos de escolas secundárias a empreenderem investigação científica. Num inquérito realizado, os alunos indicaram quais os benefícios que obtiveram com o trabalho de investigação, alguns dos quais não estão directamente ligados à ciência. Por exemplo, aprenderam a não aceitar, sem confirmação, a informação que lhes é apresentada, aprenderam a superar o insucesso, adquiriram mais confiança em si próprios à medida que dominariam o pensamento científico e se tornavam conscientes das suas qualidades e limita-

ções; tomaram conhecimento das dificuldades envolvidas no trabalho de investigação e do desafio envolvido na comunicação de resultados (1).

A Sociedade Portuguesa de Química possui um exemplar do programa da reunião, bem como informações sobre a ASE e uma lista de publicações desta associação. Os folhetos respectivos poderão ser consultados pelos interessados, mediante contacto para

(1) Martin-Royle, A. Pupil's eye view of research. *New Scientist* (1979) **82** (1159), 919.

Mariana P. Pereira  
Liceu de Queluz

## INTERFACE



Coordenação de  
J.A. Martinho Simões

INTERFACE pretende ser uma rubrica do Boletim da S.P.Q. onde se abordem temas científicos de forma simples e pedagógica. Os artigos deverão, no entanto, atingir um grau de profundidade suficiente para que, por si sós, possam constituir material útil para quem os ler.

INTERFACE será um veículo para que especialistas, docentes do terciário, divulguem matérias da sua preferência, tendo em atenção as condições supracitadas.

INTERFACE é fundamentalmente dirigida aos professores do secundário, a quem se pede, igualmente, colaboração e/ou ideias de assuntos a tratar em próximos números do Boletim.

Os interessados em submeter trabalhos ou ideias devem contactar: J. A. Martinho Simões, Departamento de Química-Física, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1000 Lisboa.

# QUÍMICA DOS PROCESSOS CATALÍTICOS

## CURSO DE POST-GRADUAÇÃO

**INÍCIO:** MARÇO/ABRIL 1981

**DURAÇÃO:** 2 ANOS, INCLUINDO NO 1.º ANO AS SEGUINTE MATÉRIAS:  
CINÉTICA, QUÍMICA ORGANOMETÁLICA, BIOQUÍMICA, MECANISMOS REACCIÓNIS, REACÇÕES ENZIMÁTICAS, QUÍMICA-FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO E DAS SUPERFÍCIES, PROJECTO E OPERAÇÃO DE REACTORES, POLIMERIZAÇÃO, HIDROGENAÇÃO, HIDROFORMILAÇÃO, OXIDAÇÃO, ETC.  
O 2.º ANO É DEDICADO A UM PROJECTO DE INVESTIGAÇÃO

ABERTO A LICENCIADOS EM QUÍMICA E EM ENGENHARIA QUÍMICA  
PARA MAIS DETALHES CONTACTAR:

**A. ROMÃO DIAS**

CENTRO DE QUÍMICA ESTRUTURAL, COMPLEXO I  
INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO  
AV. ROVISCO PAIS, 1096 LISBOA — CODEX

# SEGURANÇA



Coordenação de  
M. J. O. Baptista

## MERCÚRIO

O mercúrio é um líquido prateado, de peso elevado e insolúvel na água.

**LIBERTA UM VAPOR MUITO VENENOSO**, devendo evitar-se a sua inalação e o contacto com os olhos e a pele. VLT \* ,05 mg m<sup>-3</sup>.

Este é talvez um dos produtos químicos que é manuseado mais descuidadamente em muitos laboratórios, apesar de o seu vapor poder causar graves efeitos tóxicos.

**Efeitos tóxicos** — O mercúrio vaporiza à temperatura ambiente e a inalação do seu vapor por períodos prolongados pode provocar alterações progressivas e irreversíveis no sistema nervoso.

Concentrações elevadas do vapor poder causar sabor metálico, náuseas, dores abdominais, vômitos, diarreia e dores de cabeça. A exposição contínua ao vapor de mercúrio pode originar distúrbios nervosos graves, incluindo tremores das mãos, insónias, perda da memória, irritabilidade e depressão, acompanhados de abcessos nas gengivas e salivação excessiva.

Os efeitos descritos podem surgir em consequência de absorção cutânea ou de ingestão, que podem ainda causar lesões renais.

O contacto prolongado do mercúrio com a pele pode causar dermatites.

**Cuidados especiais** — A não ser que seja absolutamente necessário, nunca deixar mercúrio em recipientes abertos; em muitos casos é possível cobrir a superfície do mercúrio com uma camada de água ou de outro líquido não tóxico.

Trabalhar sempre numa bancada que permita a recolha de **todo** o mercúrio entornado (são surpreendentemente elevadas as concentrações de vapor liberto de mercúrio retido em interstícios e rachas das superfícies de trabalho e soalhos).

A colocação de todos os recipientes contendo mercúrio em tabuleiros permite uma recolha mais fácil de todo o mercúrio derramado acidentalmente.

Todo o trabalho que envolva o manuseamento de mercúrio deve ser efectuado numa hote com extracção eficiente.

Quando se usam bombas de difusão de vapor

de mercúrio em equipamento de alto vácuo, deve colocar-se uma trapa arrefecida no local de descarga; o tubo de saída das bombas deve ser conduzido directamente para o exterior.

O mercúrio sujo deve ser mantido coberto com uma camada de ácido sulfúrico diluído enquanto aguarda limpeza e destilação.

Em laboratórios em que se trabalhe rotineiramente com quantidades apreciáveis de mercúrio devem ser feitas estimativas periódicas da quantidade de vapor de mercúrio na atmosfera, para o que existem aparelhos próprios.

**Reacções perigosas** — O contacto prolongado entre mercúrio e amoníaco produz um sólido explosivo. O mercúrio reage violentamente com bromo seco. O dióxido de cloro explode quando agitado com mercúrio.

A facilidade com que o mercúrio forma amálgamas com metais pode causar problemas graves de corrosão em material metálico e contactos eléctricos.

**Remoção de resíduos** — Todo o mercúrio derramado acidentalmente deve ser **imediatamente** recolhido. As gotículas de mercúrio são mais facilmente apanhadas por sucção com um tubo capilar ou pipeta Pasteur ligada a um sistema de vácuo.

O mercúrio alojado em locais de onde é difícil a sua remoção deve ser tornado não volátil por adição de zinco em pó, com o qual forma o amálgama.

## COMPOSTOS DE MERCÚRIO

É muito variável a solubilidade e toxicidade dos compostos de mercúrio. Desses compostos alguns são líquidos que libertam VAPOR MUITO VENENOSO, outros são sólidos e a sua toxicidade não é bem conhecida. Por exemplo, o acetato de fenilmercúrio(II) parece ser relativamente pouco tóxico, mas os **compostos de alquilo** são MUITO VENENOSOS (VLT (pele) 0,01 mg m<sup>-3</sup>).

Há alguns anos foi referido o facto de muitos dos grandes lagos da América do Norte terem sido contaminados por mercúrio proveniente dos efluentes de fábricas; os peixes pescados nesses lagos frequentemente continham mercúrio em

concentrações superiores a 1 ppm ( $1 \text{ mg kg}^{-1}$ ) e por vezes da ordem dos 6 a 12 ppm!!! Nos peixes o mercúrio encontra-se principalmente sob a forma de metilmercúrio, agente causador de lesões irreversíveis no sistema nervoso (doença de Minamata).

---

## UM NOVO PROCESSO

---

### PARA A SEPARAÇÃO DE CARVÃO

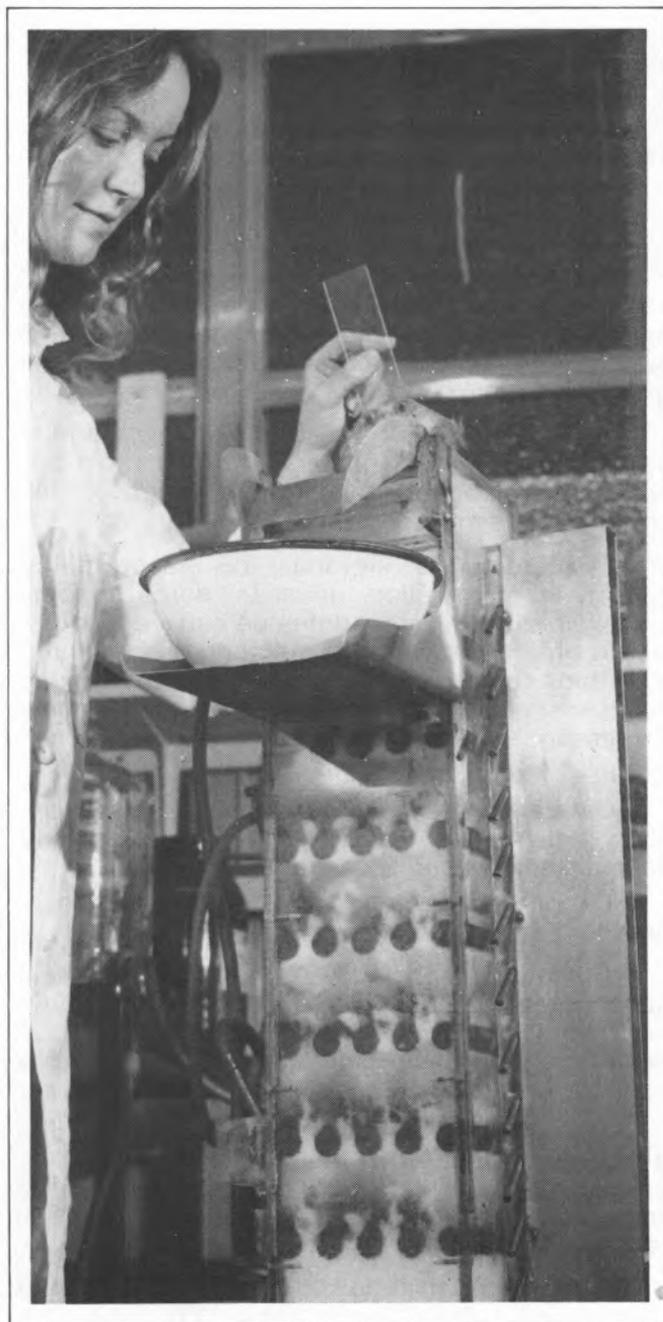
---

Na Universidade de Leeds, e com o apoio da Corporação Britânica para o Fomento da Investigação, foi aperfeiçoado um novo tipo de processo de flutuação para separar as partículas de carvão das pedras, sujidade e argila. Este processo será utilizado numa nova instalação com capacidade de 10 toneladas por hora, que será posta em funcionamento pela Junta Nacional do Carvão.

Trata-se de um processo que permite a separação de partículas finas utilizando uma mistura de lodós com um detergente apropriado. A mistura forma uma espuma em que as partículas de carvão aderem às bolhas de ar e ascendem dentro de um depósito. Até ao momento o processo mostrara-se pouco satisfatório pois apenas se tinha conseguido uma separação perfeita utilizando vários depósitos, o que tornava o processo anti-económico.

O aperfeiçoamento conseguido consiste na colocação de vários depósitos ligados entre si, colocados uns por cima dos outros. As separações ente os depósitos são constituídas por grades alternativas, que podem ser deslocadas para cima ou mantidas em posição. À medida que vai aumentando a pressão no compartimento inferior, as bolhas empurram para cima as grades de separação, permitindo a passagem da espuma que contém as partículas de carvão ao compartimento imediatamente superior. Durante o processo rebentam algumas bolhas, o que produz mais lodo. Dão-se então novas separações, que fazem com que as bolhas passem ao compartimento seguinte, no qual se volta a repetir o processo.

Deste modo todo o processo se desenvolve numa só instalação. Poderá conseguir-se uma maior capacidade colocando mais depósitos em paralelo, todos eles accionados por uma só bomba. Este processo, que se crê venha a ser utilizado em muitos países, poderá aplicar-se ainda, para além do carvão, à separação de metais.



# DOS ESTATUTOS DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Artigo 1.º — A «Sociedade Portuguesa de Química» tem por objectivo promover, cultivar e desenvolver, em Portugal, o ensino, a investigação e a aplicação da Química e das Ciências com esta mais directamente relacionados.

Artigo 2.º — A «Sociedade Portuguesa de Química» tem a sua Sede em Lisboa e Delegações em qualquer ponto do território nacional onde se justifiquem. Por «Delegação» entende-se uma representação permanente da Sociedade, com actividade própria. A criação ou dissolução de Delegações depende de aprovação da Assembleia Geral da Sociedade Portuguesa de Química.

Parágrafo único — Consideram-se desde já criadas as Delegações de Coimbra, Lisboa e Porto.

Artigo 4.º — A «Sociedade Portuguesa de Química» tem cinco categorias de sócios: a) Sócios honorários; b) Sócios beneméritos; c) Sócios Colectivos; d) Sócios efectivos; e) Sócios estudantes. (...) Serão **sócios colectivos** instituições públicas ou privadas com actividade no domínio da Química ou de Ciências afins. Serão **sócios efectivos** indivíduos, nacionais ou estrangeiros, cuja actividade profissional se processe no domínio da Química ou de Ciências afins, ou que tenham dado provas de terem contribuído para o progresso dessa Ciência ou para a realização de outros objectivos da Sociedade. Serão **sócios estudantes** os estudantes que se interessem pelo estudo da Química ou de Ciências afins.

Artigo 5.º — A admissão de sócios colectivos, efectivos e estudantes é feita pela Direcção da Delegação respectiva, devendo a proposta ser subscrita por dois sócios efectivos em pleno uso dos seus direitos.

Parágrafo primeiro — Os sócios colectivos, efectivos e estudantes podem escolher a delegação à qual desejam pertencer, sendo-lhes também facultadas a transferência para qualquer outra Delegação quando o requeiram, com a única limitação de o fazerem uma só vez em cada ano social.

Artigo 7.º — A quota mínima anual dos sócios colectivos é de cinco mil escudos; a dos sócios efectivos é de trezentos escudos; e a dos sócios estudantes é de cento e cinquenta escudos.  
(...)

Parágrafo segundo — As quotas deverão ser liquidadas durante o primeiro trimestre de cada ano. Caso tal não se verifique as regalias serão suspensas até ao pagamento integral das quotas em atraso.

Artigo 42.º — Poderão ser criados, na Sociedade Portuguesa de Química, «Divisões» com o objectivo de grupos de sócios com interesses científicos afins.

Artigo 44.º — A coordenação das actividades de cada Divisão compete a um dos seus membros, eleito pelos sócios que se agregarem à Divisão.

REMETE:  
SECRETARIADO DA SOCIEDADE  
PORTUGUESA DE QUÍMICA  
AV. DA REPÚBLICA, 37.4.º  
1000 LISBOA — PORTUGAL

---