

boletim

SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE
QUIMICA



Publicação Trimestral • N.º 27 (Série II) • Março 1987

Liber III

PRINCIPIA MATHEMATICA. 387

R E G U L Æ

PHILOSOPHANDI.

R E G U L A I.

*Causas rerum naturalium non plures admitti debere, quam quæ
5 & veræ sint & earum phenomenis explicandis sufficient.*

Dicunt utique philosophi: Natura nihil agit frustra, & frustra fit
per plura quod fieri potest per pauciora. Natura enim sim-
plex est & rerum causis superfluis non luxuriat.

Newton e a Química.....	pág. 40
A simplicidade em Ciência	pág. 13

A S.P.Q. em tempo de mudança.....	pág. 5
O ensino da espectroscopia	pág. 21
A ciência do ensino da Ciência	pág. 31

SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



CORPOS GERENTES

Presidente — **M.A.V. Ribeiro da Silva**
 Vice-Presidente — **A.J. Campos Varandas**
 Secretário-Geral — **A. Romão Dias**
 Secretários-Geral Adjuntos
 — **Maria Cândida Vaz e Carlos N. Castro**
 Tesoureiro — **Edmundo G. Azevedo**

Conselho Fiscal

Presidente — **Virgílio Meira Soares**
 Vice-Presidente — **Luís Alcácer**
 Relator — **Margarida Salema**

Mesa da Assembleia Geral

Presidente — **Vitor Lobo**
 1.º Secretário — **Ferreira Gomes**
 2.º Secretário — **Luisa Abrantes**

ASSEMBLEIAS REGIONAIS

DELEGAÇÃO DO NORTE (Sede no Porto)

Assembleia Regional

Presidente — **João Cabral**
 1.º Secretário — **Raul Barroca**
 2.º Secretário — **José Luís C. Figueiredo**

Direcção da Delegação Regional

Presidente — **Manuel Ribeiro da Silva**
 Secretário — **Duarte Costa Pereira**
 Vogal — **Baltazar Romão de Castro**

DELEGAÇÃO DO CENTRO (Sede em Coimbra)

Assembleia Regional

Presidente — **A.J. Andrade de Gouveia**
 1.º Secretário — **F. Pinto Coelho**
 2.º Secretário — **Júlio A.M. Cunha Pinto**

Direcção da Delegação Regional

Presidente — **A.J. Campos Varandas**
 Secretário — **Carlos F.G. Geraides**
 Vogal — **Júlio P. de Jesus**

DELEGAÇÃO DO SUL (Sede em Lisboa)

Assembleia Regional

Presidente — **Ana Lobo**
 1.º Secretário — **Ramôa Ribeiro**
 2.º Secretário — **Fernando M.S. Fernandes**

Direcção da Delegação Regional

Presidente — **César A.N. Viana**
 Secretário — **Carlos J.R.C. Romão**
 Vogal — **Manuel Nunes da Ponte**

boletim

Propriedade e edição da Soc. Port. de Química

Director:

JOAQUIM J. MOURA RAMOS

Directores Adjuntos:

MÁRIO N. BERBERAN E SANTOS
 MARIA MATILDE MARQUES
 BELARMINO A. SALVADO BARATA

Redacção e Administração

Sociedade Portuguesa de Química
 Av. da República, 37 - 4.º
 1000 LISBOA — Tel. 73 46 37

(Horário de expediente: de 2.ª a 6.ª-feira
 das 10 às 13 horas)

SECÇÕES TEMÁTICAS:

Educação em Química e Ensino da Química

Vitor D. Teodoro (IPED)

Química e Indústria

José da Costa Reis (CNP)

Evolução Química

Hernâni Maia (Univ. Minho)

Segurança nos Laboratórios

Maria João Marcelo Curto (LNETI)

Química e Energia

Fernando Jorge Pina (UNL)

Química e Saúde

Eduarda Rosa (Fac. Farmácia Lisboa)

Computadores em Química

Fernando M.S.S. Fernandes (FCL)

História da Química em Portugal

A. Amorim Costa (Univ. Coimbra)

Congressos e Conferências

Maria Regina Tavares (LNETI)

Publicidade

MARIA MATILDE MARQUES
 Centro de Química Estrutural
 Complexo Interdisciplinar — IST
 Av. Rovisco Pais
 1096 LISBOA Codex — Tel. 57 26 16 — Ext. 266

Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores e as opiniões neles defendidas não envolvem as direcções do Boletim e da Sociedade Portuguesa de Química.

Boletim da Sociedade Portuguesa de Química

N.º 27 (II Série) • Março 1987

SUMÁRIO

- Informações, actualidade 2
- A Sociedade Portuguesa de Química em tempo de mudança, *Alberto Romão Dias* 5
- Do simples e verosímil em Química. John Dalton e Karl Popper, *A. M. Amorim da Costa* 13
- Eléctrodo padrão de hidrogénio construído no laboratório com H_2 produzido *in situ*,
Inês T. S. Fonseca 18
- Espectroscopia: algumas ideias, *J. C. Conte* 21
- Abordagens científicas do ensino da Ciência, *Frederick Reif* 31
- Classificação de conceitos fundamentais em Cinética Química,
Lídia Albuquerque e Rafael Gonçalves 37
- Newton e a Química. No tricentenário dos *Principia Mathematica*, *A. M. Amorim da Costa* 40
- Correspondência 43
- Congressos e conferências, *Maria Regina Tavares* 45

Informações, actualidade

Louis de Broglie (1892-1987)

Com o falecimento recente do Professor Louis de Broglie desapareceu o último dos grandes físicos desta inclita geração que, há já mais de meio século, revolucionou irreversivelmente as nossas concepções sobre a estrutura da matéria. E, para prestar a devida homenagem à sua memória, há que recordar aqui o essencial da sua bibliografia científica.

Nascido numa velha família de alta nobreza, o príncipe de Broglie concluiu os seus estudos secundários em 1907, simultaneamente em Matemática e Filosofia. No ano seguinte, já licenciado em História, iniciou estudos de Direito, mas os problemas físicos e filosóficos levantados pela descoberta da teoria da Relatividade e pelo advento da constante quântica atraíram-no a tal ponto que decidiu mudar de rota e licenciar-se em Física (1911-13). Seria doravante um físico, embora as marcas da sua formação inicial permanecessem no interesse profundo que sempre manifestou pela História e pela Filosofia das Ciências.

Mobilizado em 1914 como radio-electricista, ocupar-se-ia durante os anos da 1.ª Grande Guerra dos problemas técnicos, então ainda na infância, levantados pelas telecomunicações. Foi decerto uma experiência pessoal enriquecedora porque, muitas décadas mais tarde, mantinha-se bem informado de tudo quanto ocorria nesse domínio, aparentemente tão distante das suas preocupações científicas. Em todo o caso, só em 1919 é que Louis de Broglie ficou novamente disponível para retomar a sua meditação sobre o problema dos quanta. Frequentava então assiduamente o laboratório de Maurice de Broglie, seu irmão mais velho, onde se investigavam sobretudo as propriedades corpusculares dos raios X. Mas no meio desse grupo de brilhantes experimentadores ele permanecia solitário, fascinado por questões mais gerais de índole teórica: como entender os sucessos da teoria atômica de Bohr-Sommerfeld, construção híbrida onde se sobrepunham às leis da Física Clássica regras arbitrárias de quantificação que as contradiziam?

Só nos começos de 1923 é que Louis de Broglie encontrou resposta às questões que tanto o preocupavam. Em três Notas apresentadas nesse ano à Academia das Ciências de Paris pretendia ele que as estranhas propriedades dos edifícios atômicos, essas discontinuidades manifestadas pela necessidade de introduzir números inteiros na descrição do seu comportamento, eram uma mera consequência de a matéria, tal como a luz, também possuir propriedades ondulatórias. Apoiando-se sobretudo na Relatividade einsteiniana, que conhecia profundamente, de Broglie deduzira desta ideia inverosímil consequências precisas que hoje se tornaram

clássicas, nomeadamente a fórmula $\lambda = h/p$, a identificação do princípio de Fermat em Óptica com o princípio de Maupertuis em Mecânica ou a demonstração de que a uniformidade das ondas de matéria implicava a validade do postulado de quantificação dos estados estacionários.

Sob uma forma mais acabada, estes resultados foram apresentados como tese de doutoramento, submetida à aprovação prévia de Paul Langevin, que era na época um dos mais conceituados especialistas franceses quer em Relatividade, quer em teorias quânticas. Mas as ideias de base deste trabalho eram tão inovadoras que o próprio Langevin o considerou "extravagante"; teve porém a prudência de o enviar ao seu amigo Einstein o qual, entusiasmado, foi de opinião que de Broglie "tinha levantado uma ponta do grande véu". E, assim, a tese pôde ser brilhantemente defendida, em Novembro de 1924, perante um júri presidido por Jean Perrin e no qual participavam Elie Cartan e Charles Mauguin, além do próprio Langevin como membro convidado. Embora todos os membros do júri tivessem considerado essa tese de uma originalidade excepcional — era difícil dizer menos — todos eles confessariam mais tarde o seu cepticismo quanto à realidade física dessas "ondas de matéria" as quais, segundo de Broglie, seriam certamente detectáveis por experiências do tipo clássico, como as interferências ou a difracção. E nem foi preciso esperar três anos para que Davidson e Germer, fazendo incidir um feixe de electrões lentos sobre um cristal de níquel, verificassem a existência das con-



Louis de Broglie em 1970 aos 78 anos

tróversas ondas broglianas. De há muito aprendemos a reproduzir com elas todos os fenómenos característicos das ondas electromagnéticas, o que significa que há razões idênticas para crer na existência de ambas elas. E a microscopia electrónica, com a sua formidável gama de aplicações científicas e técnicas, está aí para nos recordar as consequências que podem ter as puras especulações de um teórico. O prémio Nobel que de Broglie recebeu em 1929 era o reconhecimento do valor da sua obra.

Entretanto, em 1926, Schrödinger eliminara a principal lacuna de que padecia a teoria de de Broglie, descobrindo a equação não relativista que governa as ondas de matéria; Pauli generalizou-a, logo a seguir, introduzindo-lhe o spin, enquanto outros (entre os quais o próprio de Broglie) a transcreviam no quadro relativista, abrindo o caminho para que Dirac, numa espécie de operação de magia lógica, obtivesse as famosas equações relativistas da partícula de spin $\frac{1}{2}$. O formalismo quântico avançava de vento em popa e não havia dúvidas quanto à natureza estatística das previsões dele resultantes mas o desacordo era flagrante sobre a maneira como convinha interpretar essas leis probabilísticas.

Tentando preservar a inteligibilidade do mundo físico, de Broglie tentara conceber um modelo de partícula que fosse, simultaneamente, corpúsculo e onda e, por isso mesmo, susceptível de ser descrita no quadro do espaço e do tempo; as leis probabilísticas da Microfísica seriam, assim, a manifestação de uma causalidade subjacente, e as relações de Heisenberg traduziriam apenas as irremediáveis limitações do observador sobre a dinâmica dos sistemas quânticos. Era uma teoria muito ambiciosa e cujo desenvolvimento comportava sérios problemas matemáticos de modo que, quando o grande afrontamento ocorreu, na V Conferência Solvay realizada em Outubro de 1927, de Broglie só podia apresentar as suas teses sob uma forma ainda incipiente. Contra ele, e Einstein, e Schrödinger e o velho Planck, uma coorte brilhante e bem organizada incluindo Bohr, Born, Heisenberg, Dirac e Pauli fez prevalecer a interpretação da Mecânica quântica de epistemologia positivista que se tornou paradigmática: as leis de probabilidades como limite definitivo do conhecimento possível, as relações de Heisenberg exprimiam um indeterminismo essencial, os micro-objects era estranhos seres proteiformes que, consoante as circunstâncias, se apresentavam ora como ondas ora como corpúsculos.

De Broglie resignou-se então a adoptar o ponto de vista maioritário, porque estava ciente das dificuldades a vencer no desenvolvimento das suas ideias mas também porque tinha outros projectos de trabalho que o interessavam muito. Na verdade, parecia-lhe inaceitável que, estando a teoria dos fotões na origem do problema do dualismo onda-corpúsculo, ninguém estivesse preocupado em inserir o fotão no quadro conceptual da Mecânica quântica. Para o conseguir, foi levado a "fundir" matematicamente duas equações de Dirac (duas partículas de spin $\frac{1}{2}$) esperando assim obter simultaneamente a descrição de uma partícula de spin 0 e outra de spin 1; as equações que obteve para as partículas de spin 1 (como o fotão) revelam-se quase miraculosas pois, escritas em termos vectoriais, reproduziam as equações clássicas de Maxwell só acrescidas de uns tantos termos que se anulam com a massa da partícula. Todo o Electromagnetismo se integrava no formalismo quântico graças a esta Mecânica ondulatória

do fotão, cujo desenvolvimento ulterior deu aso a uma Teoria geral das partículas com spin.

Não farei aqui qualquer referência aos numerosos trabalhos publicados por de Broglie como, por exemplo, a óptica electrónica, a Termodinâmica relativista, a teoria dos guias de onda ou o campo subtrativo, pois interessa sobretudo assinalar a grande viragem sofrida pela sua carreira científica no começo dos anos cinquenta. Tendo procedido a uma análise crítica exaustiva dos fundamentos da Mecânica quântica, concluiu que a teoria aceite se revelava insatisfatória, tornando-se pois necessário procurar reconstruí-la noutros moldes. Perante o ceptivismo ou a hostilidade dos seus pares, dos quais só Einstein lhe endereçou uma palavra de apoio, esse homem coberto de honras ia ousar arriscar o seu prestígio para ser fiel à sua verdade.

A partir daí, de Broglie empreendeu um imenso esforço para desenvolver uma versão diferente da teoria dos quanta, baseada nas ideias que já tinha esboçado em 1927, e não são aqueles que, como eu, tentaram modestamente apoiá-lo nessa tarefa os mais indicados para fazer um julgamento imparcial dos resultados assim alcançados. Não se poderá, contudo, deixar de reconhecer pelo menos que esta tentativa de de Broglie teve o mérito de desbloquear as investigações sobre um tema importante até aí quase interdito, que a sua "teoria da dupla solução", embora ainda permaneça inacabada, constitui hoje a alternativa mais promissora à formulação ortodoxa, que o problema em causa não é de índole metafísica (como alguns quiseram fazer crer), pois em breve haverá respostas experimentais a questões essenciais no debate. A derradeira fase da obra brogliana, aventura ousada de um espírito corajoso, aguarda o julgamento da história.

Não quero concluir sem um testemunho pessoal. Louis de Broglie não era somente um cientista de craveira excepcional e de imensa cultura, de quem se podia ouvir, acidentalmente, uma reflexão sobre a sintaxe da língua portuguesa, um comentário sobre a poética de Victor Hugo ou um ensinamento tirado da obra de Newton. Para além de tudo isso, com a sua lendária timidez, a sua aristocrática cortezia, essa estranha ignorância das realidades comezinhas do quotidiano, era um homem de uma profunda e púdica bondade, e os que tiveram o raro privilégio de conviver de perto com ele não veneram apenas a memória de um físico de génio mas também a de um ser profundamente humano.

João Andrade e Silva

Departamento de Física, Faculdade de Ciências de Lisboa

I Encontro sobre Educação em Ciências

A área de Metodologias de ensino da Unidade Científico-Pedagógica de Ciências da Educação da Universidade do Minho está a organizar o **I Encontro sobre Educação em Ciências: Aspectos actuais do Ensino-aprendizagem das Ciências da Natureza**, que decorrerá de 27 a 30 de Maio de 1987.

Este encontro destina-se a 350 professores do ensino: básico, secundário, superiores.

Do programa científico constarão conferências, uma mesa-redonda e "workshops" sendo algumas destas últimas

específicas para determinados níveis de ensino (ver literatura sobre "workshops").

Local

O levantamento de documentação, a sessão de abertura e as conferências terão lugar no Seminário de Santiago. As "workshops" terão lugar nas instalações da U.M., na rua Abade da Loureira, e na Casa da Cultura.

O secretariado do Encontro funcionará no Seminário de Santiago.

Inscrição

Deverá ser feita através da correspondente ficha a remeter à Comissão Organizadora. O número de participantes está limitado a 350 pelo que apenas serão aceites as primeiras 350 inscrições.

Os preços de inscrição são os seguintes:

Até 15 de Abril — 5000\$00

Após 15 de Abril — 7000\$00

A inscrição dá direito de acesso à sessão de abertura, a todas as conferências, a 2 "workshops", à pasta com documentação, à tradução simultânea das conferências em inglês e francês e ao cocktail de abertura.

Confirmar-se-á por correio a inscrição no encontro e nas "workshops".

"Workshops"

Cada participante tem direito a assistir a 2 "workshops". Estando o número de participantes por "workshop" limitado, a inscrição nas mesmas será efectuada por ordem de entrada da inscrição no Encontro e com base nas preferências indicadas na ficha de inscrição. Recomenda-se a indicação de seis alternativas. Caso as seis alternativas indicadas estejam já preenchidas o participante será inscrito em duas "workshops" que ainda tenham vagas. Não haverá tradução das "workshops" organizadas por especialistas estrangeiros.

Exposições

Durante o Encontro decorrerá uma exposição de material didáctico, técnico e científico.

A exposição estará aberta nas tardes dos dias 27 a 29 especialmente para aqueles participantes que em cada um destes dias não participarem em "workshops".

Para mais informações contactar para:
Comissão Organizadora do I ESEC
Universidade do Minho
R. Abade da Loureira
4700 - Braga
(Tel.: 27768/27776)

Homenagem a Anastácio da Cunha (1744-1787)

Cumpre-se este ano o bicentenário do falecimento de José Anastácio da Cunha. Nascido em Lisboa onde frequentou a escola dos oratorianos, cedo revelou interesse pelo estudo da física e matemática, tendo sido tenente de artilharia em Valença do Minho, Pombal nomeou-o lente de Geometria na Universidade de Coimbra em 1773. Na «viradeira» antipombalina foi preso pela Inquisição em 1778 «por heterodoxia e leituras perigosas», sujeito a auto da fé e condenado a reclusão na Casa do Oratório, onde redigiu a sua obra prima «Princípios Matemáticos». Pina Manique aproveitou-o como pedagogo no Colégio de S. Lucas, na recém criada Real Casa Pia, onde sobreviveu os seis últimos anos da sua vida «nunca mais tendo alegria nem saúde». Leitor e tradutor de autores clássicos e iluministas, foi autor dum «Ensaio sobre os Princípios de Mecânica» e duma notável obra poética, apresentada por Hernâni Cidade como precursora do romantismo.

Não obstante a sua ímpar estatura científica e literária, que o fez ser «um daqueles homens raros que nas nações cultas costumam aparecer», a sua obra caiu hoje no esquecimento, pelo que se torna imperioso reparar esta injustiça histórica, realçando a sua posição de destaque no século das luzes em Portugal e colocando-o na História da Matemática mundial entre os precursores da reforma do cálculo infinitesimal operada pouco depois da sua morte prematura por Bolzano, Gause, Cauchy, Abel e outros matemáticos do século XIX.

No âmbito duma homenagem nacional a Anastácio da Cunha, entre outras iniciativas a promover, o Departamento de matemática da Universidade de Lisboa propõe a realização, na segunda metade de 1987, de um colóquio com contribuições nacionais e internacionais sobre a sua vida, obra e época, centrando a tónica na componente científica e seu enquadramento histórico-cultural.

A Sociedade Portuguesa de Química em tempo de mudança

A. Romão Dias ^a

De 6 a 11 de Abril do corrente ano realizar-se-á no Porto o X Encontro Anual da SPQ, altura em que se comemorarão solenemente as bodas de diamante da nossa Sociedade. A escolha da cidade do Porto para a realização deste Encontro (quebrando, assim, a rotatividade habitual que o levaria à região sul) faz-nos voltar ao local da Fundação da Sociedade Chimica Portuguesa. Durante o X Encontro realizar-se-á uma Assembleia Geral da SPQ* onde serão eleitos os novos corpos directivos nacionais (Secretário-Geral, Secretários-Gerais Adjuntos, Tesoureiro, Mesa da Assembleia Geral e Conselho Fiscal).

O 10.º Encontro, em 1987, marcará o fim de uma época da vida da SPQ, pós 1974, que foi essencialmente uma época de relançamento e durante a qual se criaram também algumas rotinas de funcionamento. Simbólico talvez do fim de um período ainda mais alargado da história da SPQ foi o falecimento, em Novembro de 1986, de Herculano de Carvalho, figura importante no passado da Sociedade e que, até à morte, continuou a ser o Director da Revista Portuguesa de Química.

1987 tem de ser o tempo de mudança: ou se injecta novo sngue e nova dinâmica na vida da Sociedade ou então as rotinas que começaram por ser saudáveis transformar-se-ão em rotinas rotineiras e a SPQ caminhará para um novo estiolamento.

É principalmente isto que torna o X Encontro e as eleições que então se vão realizar tão importantes para a Vida da Sociedade. **Impõe-se, pois, a todos nós, sócios da SPQ, que façamos uma reflexão sobre o futuro que desejamos para a nossa Sociedade e que participemos maciçamente nas decisões que podem influenciar esse futuro.**

Como a estratégia para a construção do futuro assenta, naturalmente, no conhecimento do passado e do presente parece-me oportuno lembrar aos colegas, em breve balanço e, na minha visão, o que foi a história recente da SPQ e à qual estive intimamente ligado. Estas breves notas não pretendem, de forma alguma, ocupar o espaço de uma História da nossa Sociedade, tarefa que se impõe mas que até hoje descurámos.

O Boletim da SPQ foi a primeira manifestação dirigida a todos os sócios que mostrou que a sociedade voltava a estar activa. O ponto da situação foi feito no Editorial do 1.º número, publicado há quase dez anos, em Junho de 1977, sob a direcção da Ana M. Lobo:

«Em Fevereiro de 1974 foi criada a Sociedade Portuguesa de Física tendo ficado a Sociedade Portuguesa de Química como continuadora da antiga Sociedade Portuguesa de Química e Física. Por razões várias a Sociedade Portuguesa de Química teve um longo período de estagnação. Recentemente, entre um grupo de

peças mais ligadas à Sociedade Portuguesa de Química, surgiu o impulso de relançar a Sociedade. Estas pessoas organizaram-se em Comissão ad hoc e em Julho de 1975 foi eleita, em Assembleia Geral, uma Comissão Instaladora constituída por: Jorge Calado (IST), Romão Dias (IST), Cardoso Pereira (FCUL), Silveira Ramos (FCUL), J.C.R. Reis (FCUL) e César A.N. Viana (FCUL).

As tarefas cometidas a esta Comissão foram, numa fase de arranque, assegurar as condições mínimas de funcionamento, tentar dinamizar a Sociedade à escala nacional e programar, a curto prazo, algumas realizações que criem uma base concreta para a vida da Sociedade.

Uma das primeiras preocupações desta Comissão foi conseguir uma sede própria independente e dotada de serviços administrativos adequados. Em seguimento a conversações havidas com o Instituto de Alta Cultura foi possível concretizar este anseio graças à concessão de um subsídio especial que permitiu o aluguer de um andar (...) para a instalação da nossa Sociedade em conjunto com outras Sociedades congéneres (...).

Também naquele 1.º número do Boletim se dá conta da situação da Revista Portuguesa de Química:

«Como é do conhecimento dos sócios também a publicação da Revista Portuguesa de Química sofreu grande interrupção mas julgamos ter ultrapassado as dificuldades e estamos, neste momento, a preparar a publicação dos números atrasados e relativos aos volumes 16 (de 1974) a 19 (de 1977). Nomeadamente os dois primeiros números do volume 16 já foram recebidos do impressor e estão prontos a serem distribuídos.»

A situação em relação ao pagamento das quotas também é aí referida:

«Dado que nos últimos anos não têm sido recebidas quotas, o pagamento da quota de 1977 só dará direito a receber os números da Revista correspondentes ao volume 19.

Se estiver interessado em receber o volume relativo a 1974 agradecemos que nos envie, além da quota para o pagamento de 1977, a quantia referente à quota do ano de 1974.»

Para além de arranjar uma sede nacional, lançar um boletim, tentar pôr a Revista em dia e angariar novos sócios, a Comissão Instaladora procurou também cumprir o seu mandato organizando realizações que criassem uma base concreta para a vida da Sociedade. Entendeu que essa «base concreta» só poderia ser conseguida através da divulgação e promoção da investigação em Química realizada em Portugal. Assim, em 16 de Dezembro de 1976, realizou-se, no Complexo Inter-

^a Secretário-Geral da SPQ (1978-1987).

* Ver anúncio na pág. 48

disciplinar, um encontro sobre Química Orgânica e em 5 de Maio de 1977, também no anfiteatro do Complexo Interdisciplinar, realizou-se um encontro de âmbito nacional sobre Química Inorgânica. O sucesso verificou-se com estes dois encontros sectoriais deu coragem à Comissão Instaladora e a outros sócios que entretanto foram co-optados, nomeadamente M.A.V. Ribeiro da Silva e J.A. Martinho Simões, para organizarem, agora já em moldes muito mais alargados, o I Encontro Nacional de Química, que teve lugar na Fundação Calouste Gulbenkian, em Lisboa, de 4 a 6 de Janeiro de 1978.

Durante este primeiro Encontro teve também lugar uma Assembleia Geral da SPQ em que foram eleitos os órgãos directivos nacionais da Sociedade segundo os novos estatutos, recentemente aprovados em AG.

Iniciou-se aqui, o que poderemos designar, por analogia, como o *período constitucional* da Sociedade Portuguesa de Química no pós 25 de Abril. Foi então que passei a ocupar o cargo de Secretário-Geral da SPQ, cargo para o qual fui reeleito duas vezes e que em menos de um mês abandonarei. É este *período constitucional* que agora passarei a descrever de acordo com as grandes áreas de actuação.



A. Romão Dias, Secretário-Geral da S.P.Q.

Encontros anuais

O primeiro Encontro Nacional foi um sucesso inesperado. Sucesso pelo número de participantes e de comunicações, pelo nível destas e, sobretudo, pelo ambiente de convívio excepcional que então se criou entre os químicos portugueses. Suspeito que neste encontro se verificou um conhecimento mútuo entre químicos nacionais superior ao existente nas duas décadas precedentes. E surgiu logo a ideia de passar a realizar todos os anos um encontro de âmbito geral e a nível nacional.

Foram muitos os que não acreditaram que fosse possível manter a regularidade anual para os Encontros, Mas estavam enganados como o prova o facto de em 1987 irmos realizar o Décimo Encontro!

Para além de revelar uma certa regularidade na produção científica nacional na área da Química, a que rapidamente se juntou também a contribuição trazida pelos

nossos colegas espanhóis, a realização anual dos Encontros demonstrou uma excepcional dedicação e espírito de sacrifício por parte dos colegas que nas várias universidades, tiveram todo o trabalho inerente à concretização destes encontros. A comunidade química nacional deve sentir-se grata para com estes colegas.

O nível de atendimento e a qualidade científica dos Encontros tem-se mantido embora com algumas oscilações. Penso, porém, que o balanço global foi extremamente positivo. Por outro lado não posso deixar de fazer aqui as seguintes reflexões:

— Embora o número de comunicações não tenha diminuído significativamente perdeu-se, nos últimos anos, um pouco o espírito de convívio (muitos colegas só comparecem no dia em que vão afixar o «poster» e depois desaparecem) e sobretudo, o ambiente de festa colectiva da comunidade química nacional que era um dos aspectos mais positivos destes Encontros. Será que as pessoas já se conhecem bem demais? Será que os Encontros são muito longos? Será que a periodicidade anual se está a revelar cansativa? Penso que a próxima direcção da SPQ deve reflectir seriamente sobre este aspecto e fazer um inquérito junto dos sócios para orientação futura.

— A participação de químicos da indústria foi sempre muito reduzida (reflectindo também o que se passa ao nível dos sócios), apesar de todas as tentativas feitas para os aliciar. Se parte da culpa se pode encontrar na falta de imaginação da direcção da SPQ e na eventual falta de interesse prático imediato da investigação em Química realizada em Portugal, a outra parte da culpa reside certamente na estrutura e na natureza da nossa indústria química, dependente tecnologicamente e com um peso relativamente pequeno da química fina. Contribuir para influenciar uma inflexão na natureza da indústria química em Portugal é, certamente, uma obrigação da SPQ. Tentámos e falhámos. Desejamos melhor sorte aos nossos sucessores. É uma tarefa de importância decisiva a nível nacional.

— Em todos os encontros mantivemos uma componente dedicada ao problema do ensino e da aprendizagem da Química, como aliás, era nosso dever. Este aspecto é tão importante que a ele me referirei separadamente mais adiante. Nesta altura queria apenas referir que foram tentados vários modelos: parte científica e parte educacional simultâneas, sequenciais, separadas no tempo e/ou no local. Embora, pessoalmente, seja adepto da fórmula sequencial (como vai voltar a ser adoptado no X Encontro) devo confessar que não tenho a certeza sobre qual dos modelos serve melhor os objectivos dos Encontros. Talvez esta seja outra área em que a próxima direcção deva fazer um inquérito aos sócios.

Encontros sectoriais e de divisão

Este foi um campo em que a dinâmica da SPQ nos últimos dez anos foi nitidamente insuficiente. Não rejeito as culpas que me possam caber pessoalmente mas creio que há outros factores a ter em consideração e que reflectem um pouco da natureza da nossa comunidade científica:

— A sua aparente falta de iniciativa e de capacidade organizativa. E digo aparente porque quando se trata de organizar reuniões no âmbito das organizações internacionais (NATO, IUPAC, p.e.) em que o dinheiro é «fácil» e em que o prestígio para o indivíduo que a organiza é elevado, não faltam voluntários. Não tenho

nada contra este tipo de reuniões, antes pelo contrário. Gostaria, porém, de ver também todo esse fervor organizativo aplicado na organização de um encontro sectorial no âmbito da SPQ; não direi que dá mais trabalho, mas certamente que não contribui tanto para o desenvolvimento da rede de contactos internacionais do organizador. Contribuiria, porém, bastante para a conjugação de esforços e para a promoção da Química que é feita em Portugal.

— A sua pequena dimensão. O que por si só não é desculpa pois aquela foi várias vezes ultrapassada através de «joint-ventures» com os nossos colegas espanhóis e até com estes e com os franceses.

— A continuada dependência face aos grupos estrangeiros. Se há muitas razões para que isto aconteça talvez seja embaraçoso perguntar porque é que não começa a deixar de ser assim.

Mas, apesar de tudo, alguma coisa foi feita. Para além do Encontro Internacional de Educação em Química, em 1978 (a que me referirei adiante) são de mencionar: O encontro sobre Dinâmica Molecular realizado em Coimbra em 1982, a participação nos encontros sobre Termodinâmica das soluções de não-electrólitos («joint-venture» da SPQ e das Sociedades de Química Espanhola e Francesa) e os recentes encontros Luso-Galaicos de Química organizados pela região Norte em colaboração com os nossos colegas da Galiza.

O leitor poderá pensar que o espaço dedicado nestas notas ao problema dos Encontros sectoriais é despropositadamente exagerado. Não é essa a minha opinião. Creio que esses Encontros são extremamente importantes, não só porque a sua existência viria aliviar grandemente os Encontros gerais anuais, tornando-os mais curtos e reforçando-lhes a componente de convívio generalizado, mas também e principalmente porque a sua realização regular seria uma demonstração da maturidade científica da nossa comunidade química.

A história das Divisões segue de perto, e ainda mais provavelmente, a história dos Encontros Sectoriais. Exceptuando a Divisão de Educação (que, pelo menos regionalmente, funcionou embora não tenha vingado claramente a nível nacional) e o recente embrião de uma Divisão de Espectrometria de Massa, foi impossível criar Divisões. nem sequer em Química Analítica!

Educação em Química

A profunda ligação entre a «saúde» da actividade química em Portugal e o ensino desta disciplina aos vários níveis foi, desde o início, um pressuposto da nossa actividade.

Assim no I Encontro Nacional, realizado em Janeiro de 1978, foi reservada uma tarde ao debate de temas educacionais. Esta experiência revelou duas coisas; por um lado, o enorme interesse que este tema despertava e, por outro, a forma extremamente amadorista e quase que emocional como o tema era abordado. Isto levou a direcção da SPQ a organizar, logo em Outubro do mesmo ano, um Encontro Internacional sobre a Educação em Química, realizado no LNEC, com a participação de vários especialistas europeus. Na origem deste encontro esteve o contacto entretanto estabelecido com Malcolm Frazer, então Professor de Educação em Química na Universidade de East Anglia, que sugeriu a realização em Portugal (a coincidir com o Encontro) de uma reunião do grupo de trabalho sobre Educação em Química da FECS (Federação Europeia de Sociedades de Química), associação à qual a SPQ então aderiu.

Com este Encontro Internacional iniciou-se uma nova abordagem, mais profissional e mais «científica» da actividade da SPQ na área da Educação, abordagem essa que se veio a reflectir sobre a estrutura da componente educacional de todos os encontros nacionais subsequentes.

Em 1978, na altura da realização do I Encontro haveria em Portugal talvez menos de meia dúzia de doutorados em Educação; hoje esse número atinge quase as três dezenas, sendo alguns deles doutorados em Educação em Química. Sem querer, de forma alguma, reivindicar louros que lhe não são devidos, a SPQ não pode deixar, porém, de ter a sensação de ter contribuído um pouco para o avanço verificado nesta área.

Para além do nível elevado que procurou imprimir à componente educacional dos Encontros Nacionais, foram também outras as iniciativas através das quais a SPQ tentou, com maior ou menor sucesso, melhorar a qualidade do ensino de Química em Portugal e aumentar o interesse por esta disciplina. De entre as muitas iniciativas levadas a cabo são de salientar:

— As Olimpíadas da Química, dedicadas aos alunos dos anos mais avançados do ensino secundário. Esta é uma iniciativa que deveria continuar a ser acarinhada e imaginativamente desenvolvida; o sucesso que teve e o potencial que encerra justificam-no perfeitamente. O ideal seria a SPQ poder contar com um professor, praticamente a tempo inteiro, só para tratar das Olimpíadas.

— A realização, principalmente na região Norte (com destaque para as famosas experiências de salão) e na região Centro, de várias acções de actualização dos professores.

— A publicação, quer a nível nacional quer a nível regional de vários textos dedicados essencialmente aos professores do ensino secundário (ver actividade editorial).

— A publicação de uma pequena brochura (acompanhada por uma colecção de acetatos e de slides) sobre reacções ácido-base.

Antes de 1974 eram pouquíssimos os professores do ensino secundário sócios da SPQ; hoje constituem metade dos cerca de 2300 sócios. Os conhecimentos mínimos de Química que todo o cidadão (que não seja químico) deve possuir resultam essencialmente da aprendizagem adquirida no ensino secundário. Os conhecimentos de Química que os alunos têm quando entram no terciário para tirar cursos nesta área, e a motivação dos melhores alunos para seguirem carreiras ligadas à Química, resultam também do ensino que for ministrado no secundário. Todas estas razões são sobejamente fortes para que a SPQ continue a dedicar o melhor da sua atenção ao ensino da Química no secundário e aos seus professores. o que não implica, antes pelo contrário, que não se presta igualmente atenção ao ensino da Química no terciário.

Publicações

A actividade editorial é uma das tarefas principais de qualquer sociedade científica. Embora com muitas dificuldades a SPQ também tem procurado cumprir essa tarefa.

A Revista Portuguesa de Química

Como já referimos, quando a primeira direcção eleita da SPQ do pós 25 de Abril tomou posse, a Revista Portuguesa de Química estava extremamente atrasada.

Os subsídios da indústria e os anúncios que asseguravam a viabilidade financeira da Revista tinham desaparecido e as dívidas na tipografia tinham parado a publicação. Foi graças ao apoio concedido pelo INIC (que neste momento assegura integralmente os custos de produção embora não os de distribuição) e à grande dedicação de Carlos Pulido e, principalmente de Luís Vilas Boas que foi possível voltar a levar a Revista a um ritmo praticamente normal de publicação. A recente mudança de Editores e de tipografia conduziu a alguns atrasos, talvez inevitáveis nestas condições.

Independentemente das dificuldades financeiras e dos eternos problemas com as tipografias existe toda uma outra problemática associada com a RPQ. A Revista é distribuída gratuitamente a todos os sócios embora exista a consciência de que são poucos os que efectivamente a lêem. Dada a muito pequena dimensão do nosso meio científico, abandonar a distribuição geral e gratuita e passar para um sistema de assinaturas seria, provavelmente, condená-la à morte. E há razões para manter a RPQ: é uma questão de dignidade nacional e é o respeito por uma iniciativa que antecedeu a própria criação da Sociedade.

É preciso atrair artigos de bom nível para a Revista. E isto só será possível se a Revista tiver uma boa divulgação internacional. Porque a comunidade química dos países de expressão portuguesa é muito reduzida, a recente decisão de publicar todos os artigos em língua inglesa (internacionalmente aceite como a língua franca da ciência) parece-me acertada. E a RPQ continua a ser referenciada pelo Chemical Abstracts, o que é bom. Só é pena que tenha sido excluída do Science Citation Index. Talvez devido à irregularidade da sua publicação. É uma situação que importa corrigir. De qualquer forma mantém-se o problema de atrair bons originais para a Revista. Isto exige uma atitude menos egoísta dos nossos químicos; e alguma imaginação para atrair bons artigos de autores estrangeiros.

O Boletim da Sociedade Portuguesa de Química

Nascido em Junho de 1977, com uma solução gráfica e de acabamentos a mais simples possível, manteve ainda a natureza artesanal até ao número 6, publicado em Dezembro de 1978. Em Julho de 1979 saiu o primeiro número da II Série, agora já impresso em tipografia, mantendo-se como Director Ana Maria Lobo, que seria substituída no número 9, de Janeiro de 1982, por Virgílio Meira Soares. Este seria por sua vez substituído, a partir do n.º 19, de Março de 1985, por Joaquim Moura Ramos, que ainda é o Director do n.º 27 (II Série) que estão a ler, mas que também acha que é altura de ser substituído.

A história da publicação dos 33 números (incluindo os 6 números da I Série) do Boletim da SPQ é novamente a ilustração da dedicação e carolice de alguns, poucos, sócios da SPQ. Apesar dos seus altos e baixos o Boletim é a publicação da SPQ com maior impacto junto dos sócios e o excelente nível conseguido nos últimos números muito deve ao seu Director J. Moura Ramos. **É absolutamente indispensável para a SPQ manter a publicação regular do Boletim, sem baixar a sua qualidade e mesmo, se possível, melhorando-a.**

Para além da necessidade de encontrar um novo Director que continue a excelente obra de Moura Ramos a principal dificuldade em relação à publicação regular do Boletim é, novamente, de ordem financeira. O preço de custo de cada número ronda os 130\$00 (fora os portes de correio), estão-se a publicar 4 números por

ano, o Boletim é distribuído gratuitamente a todos os sócios, os subsídios são insuficientes e é difícil arranjar a quantidade de anúncios que idealmente tornariam o Boletim auto-suficiente em termos económicos. São dificuldades que têm de ser resolvidas. Tem de haver mais agressividade na angariação de subsídios e de anúncios; isto implica não só imaginação mas, principalmente, disponibilidade de tempo por parte do Director e dos seus colaboradores. E é preciso a ajuda de todos os sócios.

Outras publicações

Neste campo a actividade da SPQ tem sido, infelizmente, mais modesta. A região Centro (Divisão de Educação) publicou alguns textos didácticos e, a nível nacional, para além de um pequeno texto sobre equilíbrio químico foram publicados os seguintes livros em colaboração com a Escolar Editora, de Lisboa: *Química e Sociedade I (As Moléculas da Vida)*, Moura Ramos, Hernâni Maia e A.M. Lobo, *Terminologia, Símbolo, e Unidades para Grandezas Físico-Químicas*, Maria Estela Jardim e Mariana Pereira e *Estrutura Electrónica dos Átomos*, Fernando Fernandes.

Outros títulos submetidos para publicação estão em fase de estudo.

As principais limitações à actividade editorial da SPQ no que se refere à publicação de livros são, outra vez, de ordem financeira: a publicação de um livro exige um elevado investimento o qual leva, em geral, pelo menos dois a três anos para recuperar. Foi por isso que se iniciou a *joint-venture* com a Escolar Editora. Mas os editores também não estão interessados em ter o seu capital empatado durante muito tempo. A única solução seria a SPQ, sozinha ou em *joint-venture*, publicar alguns livros que fossem *best sellers*; de preferência livros para o ensino secundário que é a área em que o público é maior. Assim se criaria a folga necessária para poderem ser publicados também livros mais especializados que tivessem uma venda mais limitada. Infelizmente os nossos sócios que escrevem livros para o secundário preferem publicar os seus livros fora do âmbito da SPQ; talvez por compromissos anteriormente assumidos ou talvez, porque arranjem assim melhores retribuições financeiras.

E existem também a Gulbenkian (felizmente, diga-se de passagem) que tem meios com os quais a SPQ não pode, evidentemente, concorrer.

Mas aqui fica o desafio: é preciso criar as condições para que um autor sinta orgulho em ter um livro que foi seleccionado pela SPQ para publicação. Mais uma vez a criação destas condições exige imaginação, dedicação e tempo disponível.

O Prémio Ferreira da Silva

Criado em 1980 o Prémio Ferreira da Silva foi anunciado e o seu regulamento descrito no Boletim n.º 5 (II Série) de Janeiro de 1981. Seria atribuído bianualmente ao químico português que, pelo trabalho produzido em Portugal no período de dois anos imediatamente anteriores ao da atribuição do prémio, mais tivesse contribuído para o avanço da Química em qualquer das suas áreas.

A primeira atribuição do Prémio foi em 1982 (Jorge C.G. Calado). Em 1984 houve duas candidaturas (António Xavier e Formosinho Sanches) e o júri decidiu atribuir dois prémios. Em 1986 **não houve candidaturas** apesar dos prazos da apresentação das mesmas terem sido alargados, o que foi noticiado no Boletim.

Também no Boletim foram pedidas candidaturas para 1987 que, pelo que sei, também não apareceram. **Não há interesse!** O que para mim é totalmente incompreensível e revela a falta de maturidade na nossa comunidade científica. Ou a falta de prestígio da SPQ. Ou a total alienação que resulta do exagerado enfeudamento dos nossos químicos a grupos estrangeiros, o que os leva a não valorizarem nada que seja português (não se confunda esta crítica com qualquer sugestão de defesa de níveis de qualidade inferiores aos que são internacionalmente aceites). Ou então ninguém está interessado em avaliar e em comparar.

Aceito perfeitamente que o regulamento do Prémio talvez não fosse o melhor. Mas a Direcção estava aberta a considerar quaisquer propostas de modificação. Que também não apareceram.

A indiferença é que é inaceitável. Conduz necessariamente ao desgaste e põe em causa se vale a pena trabalhar para tal comunidade científica.

O funcionamento geral da SPQ

Apesar de todos os esforços realizados o funcionamento da Sociedade caracterizou-se por não termos conseguido quebrar o ciclo vicioso da pobreza. Como não há dinheiro para contratar pessoal a tempo inteiro (que incluía, pelo menos, um licenciado) não há capacidade de resposta nem capacidade organizativa que permitam lançar iniciativas que, eventualmente, trariam fundos para a Sociedade. As quotas pagas pelos sócios, mesmo depois do recente aumento, pouco mais cobrem que os custos do correio e não é possível subilas mais sem correr o risco de se verificar uma quebra significativa no número de sócios. Frequentemente (mas não sempre) têm sido os lucros conseguidos nos Encontros que têm mantido a Sociedade.

A ausência de funcionários de nível adequado tem imposto aos sócios que trabalham para a Sociedade um esforço muito elevado; o que é agravado pelo facto de serem tão poucos. Aliás o nível global de participação dos sócios na vida da Sociedade (excluindo a comparencia em Encontros) tem sido extremamente reduzida. Quase como anedota lembro uma Assembleia Geral para alteração dos Estatutos que funcionou com o Presidente da Mesa e com um membro na assistência que, por acaso, era o Secretário-Geral. Aliás a expressão que sempre considerei como mais irritante e que é frequentemente ouvida em reuniões é: «a Sociedade deve fazer isto ou aquilo»; a Sociedade não é a Direcção, é o conjunto dos seus sócios e todos têm de colaborar! Sem uma máquina administrativa e sem maior participação dos sócios também nunca conseguiremos realizar outro dever da SPQ: ser não só uma sociedade científica mas, também, uma sociedade profissional (não confundir, claro, com sindical).

A ausência do tal funcionário qualificado e, principalmente, a debilidade económica também prejudicaram a interacção da SPQ com as suas congéneres a nível internacional. A SPQ continuou, durante todo este período, a estar filiada em algumas associações estrangeiras como, por exemplo a IUPAC (o pagamento das quotas, mais ou menos atrasado, tem sido feito pelo Ministério dos Negócios Estrangeiros), a European Federation of Chemical Engineers e filiou-se em 1978 na FECS (Federation of European Chemical Societies). Com frequência recebemos solicitações para participarmos em reuniões e para nomearmos delegados para os vários grupos de trabalho. Mas só muito excepcionalmente há dinheiro para custear a ida de um dos nossos

sócios a uma destas reuniões. Por vezes recebemos também pedidos de informações e de preenchimento de inquéritos por parte daquelas organizações ou das nossas congéneres estrangeiras. Mas falta-nos o aparelho organizativo que permitiria a capacidade de resposta. É outro problema cuja resolução deixamos à capacidade dos vindouros.

Muito recentemente foi assinado um protocolo de colaboração entre a SPQ e a Sociedade de Química Brasileira e esta é outra área em que importa também investir algum esforço.

O Secretário-Geral — passado, presente e futuro

Poderá parecer estranho terminar estas notas com o apontamento sobre a figura do Secretário-Geral no funcionamento da SPQ. Considero, porém, que a experiência obtida e as responsabilidades que me cabem pelo exercício, durante nove anos, deste cargo justificam umas breves considerações.

Do ponto de vista geral de funcionamento da SPQ tenho hoje a convicção de que a existência de um Presidente e de um Secretário-Geral, ambos exercendo as funções no seu tempo livre, não se justifica. Creio que futuramente o ideal seria ter um Secretário-Geral (licenciado ou mesmo doutorado) que fosse um funcionário a tempo inteiro da Sociedade e, então, o lugar de Presidente adquiriria muito mais significado. Não sei, porém, se será esta a opinião dos três Presidentes (Maria Alzira A. Ferreira, J.J.R. Fraústo da Silva e M.A.V. Ribeiro da Silva) com quem tive o privilégio de colaborar.

Do ponto de vista pessoal devo dizer que me deu muito prazer exercer as funções de Secretário-Geral. Procurei sempre pôr as minhas capacidades, muitas ou poucas, ao serviço da SPQ. Mas devo confessar que, progressivamente, o cansaço tem vindo a instalar-se. Não por falta de ideias ou de dedicação às causas que justificam a existência da SPQ e pelas quais ela deve lutar, mas pela constante falta de meios, de funcionários, e mesmo de colegas, indispensáveis para que a SPQ cumpra a sua missão.

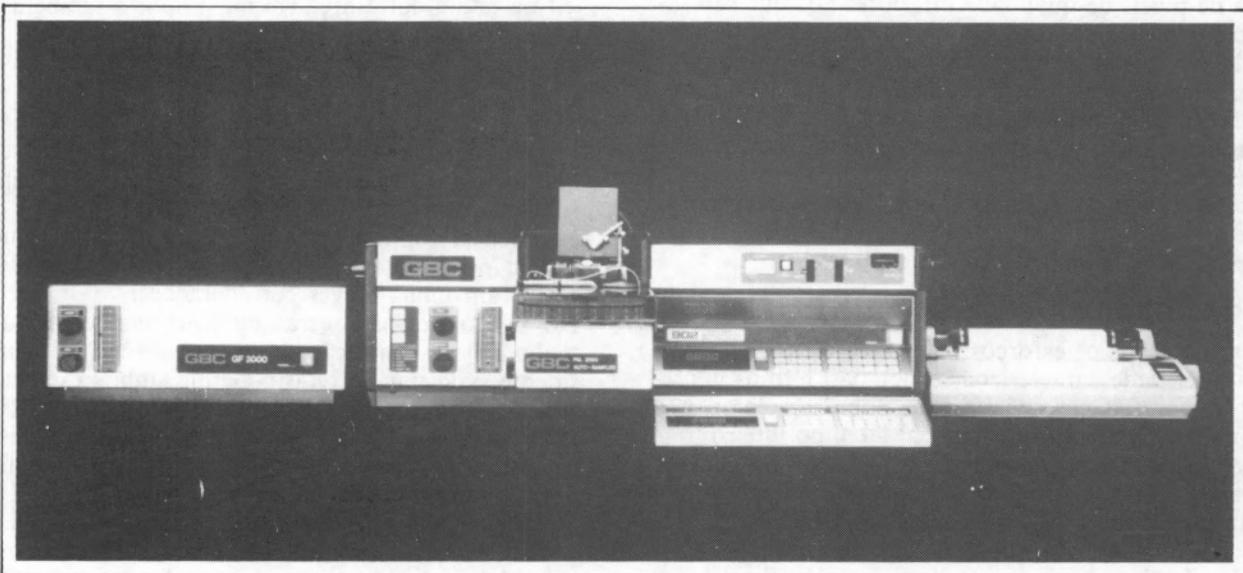
Embora creia, sem falsas modéstias, ter contribuído um pouco para a revitalização e para a continuidade do funcionamento da SPQ, não tenho qualquer dúvida que, hoje em dia, a minha continuidade no cargo de Secretário-Geral é mais prejudicial do que benéfica para a Sociedade. E é justo que fique bem claro que sem o imenso esforço, dedicação e competência da Maria Cândida Vaz, actualmente Secretária-Geral Adjunta, o funcionamento da SPQ a nível de Direcção Nacional já teria paralisado há muito tempo.

Vamos eleger, entre outros membros directivos nacionais, um novo Secretário-Geral. Para além da sua credibilidade científica, de uma grande vontade e disponibilidade para trabalhar para a Sociedade ele tem também de ser um elemento conciliador e agregador da comunidade química portuguesa. É preciso ultrapassar eventuais conflitos regionais ou pessoais e evitar a desagregação da nossa comunidade através da criação de sociedadezinhas de qualquer-coisa-química ou de química-qualquer-coisa. Espero que apareçam bons candidatos e que saibamos escolher o melhor.

Termino agradecendo a todos os que comigo mais directamente colaboraram neste longo percurso, prestando a minha homenagem a todos os que de uma ou de outra forma contribuíram para manter a vida da SPQ, e saudando toda a comunidade química nacional.

GBC

ABSORÇÃO ATÓMICA



AGORA EM PORTUGAL

ABSORÇÃO ATÓMICA CHAMA-SE:

GBC

EXCELENTES EQUIPAMENTOS

AOS MELHORES PREÇOS DO MERCADO

(2 sistemas vendidos nos primeiros 3 meses de promoção)

PEÇA-NOS UMA OFERTA.

DISTRIBUIDORES EM PORTUGAL:



DIAS DE SOUSA LDA

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 12 - 1.º D.
2625 PÓVOA DE STA. IRIA
TEL. (01) 259 23 16 - 259 24 09
TLX. 43926 DISO P

PRAÇA PEDRO NUNES, 94
4000 PORTO
TEL. (02) 93 14 99 - 93 38 09
TLX. 26250 NSC P

ÍNDICE

PROPRIEDADE DA:

Associação de Ciência e
Tecnologia para o
Desenvolvimento (ACTD)

MORADA: Av. Prof. Gama
Pinto, 2
1699 Codex Lisboa

DIRECTOR: A. Romão Dias

EDITOR: M. Eduarda Gonçalves

CONSELHO REDACTORIAL:

Fernando Bello, Ana Luísa
Janeira, Filomena Mónica, J.
Moura Ramos

CONSELHO CONSULTIVO:

A. Trigo de Abreu, J. Ferreira de
Almeida, M. Pinto Barbosa, M.
Villaverde Cabral, Jorge G.
Calado, João Caraça, João
Cravinho, Victor Crespo, L.
Veiga da Cunha, J. Dias de Deus,
J. Mariano Gago, Fernando Gil,
Jaime Reis, Mário Ruivo, J. J.
Salomon, Boaventura Sousa
Santos, J. J. R. Fraústo da Silva,
Frederico Mayor Zaragoza

DESENHADOR: Renato Abreu

DISTRIBUIDOR: GRADIVA

IMPRESSÃO:

SANTELMO/Artes Gráficas

TIRAGEM: 3000 Exemplares

NÚMERO AVULSO: 300\$00

ASSINATURA:

750\$00 (3 números)

Depósito Legal n.º 15386/87

ISSN 0870 - 7642

ENTIDADES QUE SUBSIDIARAM A PUBLICAÇÃO DESTE NÚMERO

- Junta Nacional de
Investigação Científica e
Tecnológica (JNICT)
- Fundação Calouste
Gulbenkian

EDITORIAL

2

ARTIGOS

- Ciência sem fronteiras, fronteiras sem ciência
J. J. Salomon 4
- Ciência Tecnologia e Sociedade — uma perspectiva
europeia, Arie Rip 7
- Inovação, Tecnologia e Mudança
Fernando Gonçalves e João Caraça 10
- Novas Tecnologias da Informação e Direito
M. Eduarda Gonçalves 13
- O caldeirão industrial, Jorge Calado 16

NOTAS E DOCUMENTOS

- A Ciência é para todos 27
- Necessidades em C&T para o desenvolvimento
económico 30
- JNICT — Ciência, Tecnologia e Sociedade 33
- Unidades de ensino e investigação em Ciência, Tecnologia
e Sociedade 35
- JNICT — Inovação tecnológica e desenvolvimento
regional 37
- 6.ª Conferência Parlamentar e Científica do Conselho da
Europa 38
- Declaração de Veneza — A Ciência e os limites do
conhecimento 40
- Política de investigação científica e tecnológica das
Comunidades Europeias 41

LIVROS

- Ideas of Science 45
- International Science and the role of ICSU:
a contemporary agenda 46

CORRESPONDÊNCIA

49

BANDA DESENHADA

50



**Um filósofo a dar uma lição
sobre o planetário**

Joseph Wright of Derby [1768]

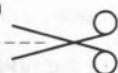
UMA PUBLICAÇÃO DA ACTD — ASSOCIAÇÃO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA PARA O DESENVOLVIMENTO



A **ACTD** é uma Associação sem fins lucrativos que tem por objectivo promover o estudo, a discussão e a divulgação da problemática e do progresso da ciência e tecnologia, em particular na perspectiva da sua aplicação para fins de desenvolvimento económico e social.

A **CTS — Revista de Ciência, Tecnologia e Sociedade** é uma publicação da **ACTD**. Visa criar um espaço de informação e de debate sobre a influência das condições sociais na criação da ciência e da tecnologia, as relações entre a ciência e a tecnologia, e o impacto destas na sociedade. E também, contribuir para a formulação de políticas científicas em Portugal. A perspectiva interdisciplinar, a estrutura e o nível equilibrado no tratamento dos temas tornam-na única no espectro editorial português. No verso desta página encontrará informação geral sobre a **CTS** e o índice do 1.º número. Esperamos que lhe agrade. Se já é sócio da **ACTD** receberá, como oferta, o 1.º número, quer faça ou não assinatura. A **CTS** foi feita para si. **Assine-a e divulgue-a**. A sobrevivência deste projecto depende da sua viabilidade económica. Se anunciar na **CTS** ajuda-nos a manter a sua publicação. Contamos com todos e, muito especialmente, com os sócios da **ACTD**.

CORTE POR AQUI



BOLETIM DE ASSINATURA DA **CTS** — REVISTA DE CIÊNCIA, TECNOLOGIA E SOCIEDADE

NOME _____

MORADA _____

LOCALIDADE _____ CÓD. POSTAL _____

PROFISSÃO _____

LOCAL DE TRABALHO _____

ASSINATURA ANUAL (1987) — 3 NÚMEROS

SÓCIO DA **ACTD** 600\$00

NÃO SÓCIO DA **ACTD** 750\$00

CHEQUE N.º _____ BANCO _____

(À ORDEM DE: ASSOCIAÇÃO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA PARA O DESENVOLVIMENTO)

DESEJO RECEBER OS ESTATUTOS DA **ACTD** E UMA FICHA DE INSCRIÇÃO

ESTOU INTERESSADO EM PUBLICAR UM ANÚNCIO NA **CTS**.

DESEJO RECEBER AS VOSSAS CONDIÇÕES DE PUBLICIDADE

Do simples e verosímil em Química.

John Dalton e Karl Popper *

A.M. Amorim da Costa ^a

Toda a ideia importante é simples

Leão Tolstói, Guerra e Paz

1. Introdução

Na sua obra *Introdução à Ciência*, Thomson definiu o intuito do trabalho científico por estas palavras: é objectivo do trabalho científico a descrição coerente e completa, em termos do mais simples possível, dos factos da experiência. E mais adiante acrescentaria ser intento contínuo de todo o labor científico «a redução dos processos naturais aos mais simples termos» (1). Por sua vez, o eminente físico nuclear Edward Teller publicou, em 1980, um livro sobre o desenvolvimento e aplicações da Ciência sob o título *The Pursuit of Simplicity* (Em Busca da Simplicidade) (2). Alertando o leitor para a possível situação paradoxal entre o objectivo que o animava e uma certa visão corrente em que o progresso científico é considerado como factor de crescente complexidade e complicação do mundo em que vivemos, o autor enuncia logo à partida a tese que se propõe mostrar ter sido o élan vital que presidiu a toda a história do desenvolvimento científico, desde a Antiguidade até aos nossos dias: «o objectivo da ciência é encontrar simplicidade e coerência no imenso mar de material acumulado por seus cultores» (ref. 2, pg. 12).

Na prossecução deste objectivo, necessário se torna recorrer à chamada rasoira de Guilherme Occam: «entia non sunt multiplicanda praeter necessitatem» — não se devem multiplicar os entes para além do necessário — em que se traduz o chamado *axioma da simplicidade*, também conhecido por *princípio da parcimónia* ou a *regra da economia das hipóteses*. Esta determina, pura e simplesmente, que em ciência, quando se tem de escolher entre duas ou mais teorias cujas explicações se revelem igualmente válidas, se deve optar, até prova em contrário, por aquela que envolva o menor número de pressupostos. Por mais difícil que seja a sua aplicação rígida em determinadas situações concretas, a verdade que lhe assiste do ponto de vista epistemológico e pedagógico, é de inegável valor.

A simplicidade é tão essencial para a ciência quanto o é a exactidão e a coerência da descrição em que se exprime e traduz. Para além de todos os arazoados estéticos e/ou metodológicos, ela tem por base sólida uma razão ontológica, aquela mesma que Newton exprimiu na sua *Primeira Regra de Filosofar*, à cabeça do Livro III dos *Principia Mathematica*:

Regula I — «Causas rerum naturalium non plures admitti debere, quam quae et verae sint et earum phaenomenis explicandis sufficient.

Natura enim simplex est et rerum causis superfluis non luxuriat» (3).

O mesmo dissera Kepler repetidamente: «Natura simplicitatem amat» — a natureza ama a simplicidade; ou «nunquam in ipsa ququam otiosum aut superfluum existit» — nunca nela existe algo de ocioso ou superfluo; ou ainda «natura semper quod potest per faciliora, non agit per ambages difficiles» — a natureza nunca age por processos difíceis sempre que pode fazer algo por processos mais simples (4).

Na mesma linha escrevia Descartes: «conhecer é apreender por intuição infalível as naturezas simples e as relações entre elas que são, por sua vez, também naturezas simples» (5).

O grande objectivo da ciência é tornar diáfano o universo em que vivemos, a Natureza, de que é predicado fundamental a simplicidade e, conseqüentemente, só na simplicidade ele se mostrará verdadeiramente diáfano e transparente (6).

Nos remotos tempos do século VI antes de Cristo, nas colónias gregas da Ásia Menor e da Magna Grécia (sul da Península Itálica) onde a História conseguiu coligir os primeiros indícios da atitude teórica, no contexto civilizacional em que vivemos, os filósofos gregos que então se votavam à contemplação e interpretação da Natureza, dialecticamente dominados por uma economia mental e partindo do mais simples, óbvio e mais ao seu alcance, postularam que todas as coisas se haviam originado no Uno e que todo o Universo constituía uma unidade harmoniosa (7). Para eles, todas as coisas se haviam formado a partir de um único elemento primordial (Thales, Anaximenes, Anaximandro, Heráclito); os quatro elementos (Empédocles) e os diversos tipos de átomos (Leucipo, Demócrito e Anaxágoras), constitutivos de todos os corpos e mundos, teriam provindo, por sua vez, duma única substância fundamental, o hyle (Platão e Aristóteles).

Nesta concepção filosófica começa a história do *axioma da simplicidade*, constantemente afirmado, em processo de contínua recorrência. A ela voltam, com efeito, século após século, na busca de um princípio unificador das generalizações factuais, os mais proeminentes fautores do pensamento científico. A história do desenvolvimento da Química é disso prova insofismável.

Logo depois da Teoria do Flogisto, primeiro princípio unificador no domínio da ciência Química, o *princípio da simplicidade* aparece-nos inerente à teoria das combinações atómicas de Dalton e a ele mantêm total fide-

* Comunicação apresentada no 9.º Encontro da Sociedade Portuguesa de Química (Bloco Educacional).

^a Departamento de Química, Universidade de Coimbra 3000 Coimbra.

lidade os seus mais próximos sequazes. Nos nossos dias, no quadro da controvérsia *indução versus dedução*, a ele voltou religiosamente a epistemologia de Popper, já não apenas como mero princípio unificador de generalizações, mas como princípio-base duma selecção natural, em parâmetros de verosimilhança, conducente à sobrevivência das teorias, no constante processo de tentativa e erro em que se tece o desenvolvimento científico.

2. A Regra de simplicidade de Dalton

Falar de John DALTON (1766-1844) é falar da sua teoria atômica da qual haveria de dizer Lothar Meyer: «é tão simples que à primeira vista não é atraente» (8). De Leucipo, Demócrito e Lucrecio, na Antiguidade, a Boyle, Descartes, Gassendi e Newton, no dealbar da ciência moderna, muitos filósofos e cientistas postularam, antes de Dalton, a existência de átomos. Depois dele, muitos outros de Mendeleev a Thomson, Rutherford, Bohr, De Broglie, Schrödinger, Heisenberg e Dirac, o fariam igualmente (9).

Postular a existência de átomos é uma teoria que em si mesma não é nem mais válida, nem mais verdadeira que qualquer teoria não-atômica da matéria que revista idêntico grau de generalização. Facto é, porém, que a emergência do conceito de átomo e seu desenvolvimento pormenorizado se traduziu, particularmente nos séculos XIX e XX, em elevado grau de unificação no domínio das ciências na Natureza.

É em Outubro de 1803, numa Comunicação científica sobre a solubilidade de gases em água, apresentada na Sociedade Literária e Filosófica de Manchester, que Dalton se refere pela primeira vez, em público, à sua teoria atômica (10). Na pegada de Newton, afirma ele que toda a matéria se compõe de átomos indivisíveis que mantêm a sua individualidade durante todas as transformações químicas e que diferem de elemento para elemento por seu tamanho e peso. Todos os átomos de um mesmo elemento são idênticos entre si, particularmente no peso. As partículas dos compostos são constituídas por um número relativamente pequeno de combinações de tais átomos.

No caso de qualquer fluido elástico, os átomos constitutivos repelem-se mutuamente com uma força que aumenta à medida que diminui a distância entre eles, no caso de se tratar de átomos de um mesmo fluido, sendo absolutamente inelásticos relativamente às partículas de qualquer outro gás, isto é, não exercendo sobre elas quaisquer forças atractivas ou repulsivas. Quer dizer, qualquer gás seria, essencialmente, um vácuo relativamente a qualquer outro gás.

A formação de misturas homogêneas por diferentes espécies de átomos, levou Dalton a admitir que os vários átomos possuíam um atmosfera de calor que seria a razão por que átomos da mesma natureza se repeliriam mutuamente, enquanto átomos de natureza diferente o não fariam. Átomos da mesma natureza teriam atmosferas de calor iguais; átomos diferentes corresponderiam atmosferas de calor de tamanho diferente da dos átomos de outras substâncias.

É a partir desta concepção básica sobre a constituição da matéria que Dalton desenvolve toda a sua teoria atômica que o levaria à sua célebre lei, a lei de Dalton, conhecida por *regra da simplicidade* ou das proporções múltiplas:

«Quando dois corpos se combinam em proporções diversas para formar vários compostos diferentes, existe uma relação simples entre os vários pesos de um deles que se combinam com um mesmo peso do outro».

Esta regra conduz às seguintes proposições:

Se dois corpos A e B se podem combinar entre si, a sua combinação ocorrerá de acordo com a seguinte ordem:

a) *Combinação binária* — um átomo de A + um átomo de B = um átomo (uma molécula) de C; b) *Combinação ternária* — um átomo de A + dois átomos de B = um átomo de D ou dois átomos de A + um átomo de B = um átomo de E; c) *Combinações quaternárias* — um átomo de A + três átomos de B = um átomo de F ou três átomos de A + um átomo de B = um átomo de G; d) *Combinações quintuplas e de ordem superior* — ... (mesmo esquema).

Porque mais simples, a combinação binária é mais natural e provável que as combinações ternárias ou quaisquer outras de ordem superior; e, pela mesma razão, as combinações ternárias são mais prováveis e naturais que as quaternárias ou quaisquer outras de ordem superior.

No caso de sínteses químicas, sejam sínteses de dois átomos ou sínteses de dois corpos já compostos de átomos, observar-se-á:

i) — quando só é possível obter uma combinação de dois corpos, deve presumir-se, até prova em contrário, que se trata de uma combinação binária;

ii) — no caso de serem possíveis duas combinações, deve presumir-se, também até prova em contrário, que uma delas é uma combinação binária e a outra uma combinação ternária;

iii) — no caso de três combinações possíveis, uma delas deve ser binária, e as outras duas, ternárias.

E assim sucessivamente...

iv) — Um composto binário deverá ser sempre especificamente mais pesado que a mera mistura dos seus dois ingredientes, como um composto ternário deverá ser sempre especificamente mais pesado que a mistura duma combinação binária com o corpo simples de que resulta a combinação ternária que o constitui (11).

Fazendo-se eco da já citada *Primeira Regra de Filosofar* de Newton, Dalton crê também que «a regularidade e a simplicidade são atributos gerais das leis da natureza», e declara expressamente ser factum observado que «a lei da síntese química é uma lei simples» (12). Foi com base nesta regra de simplicidade, por combinação dos respectivos átomos componentes segundo proporções numericamente simples, e no pressuposto decorrente do estado de conhecimento da altura que tinha a água como sendo a única combinação possível para a síntese do oxigénio com o hidrogénio, que Dalton atribuiu a este composto a fórmula OH (⊙⊙), segundo a simbologia que usava). E pela mesma razão, atribuiu à amónia a fórmula de NH (de acordo com a sua representação ⊕⊙). E daqui partiu para a primeira Tabela de pesos atômicos.

Convicto de que a água era constituída por um número incalculável de átomos duplos em que o hidrogénio se combinava com o oxigénio átomo a átomo, e sabedor de que a constituição era sempre na proporção de 8 kg de oxigénio para 1 kg de hidrogénio, Dalton concluiu que cada átomo de oxigénio era oito vezes mais pesado que cada átomo de hidrogénio. «Era uma ideia simples e maravilhosa», como lhe chamou J. Korn (13).

Da simplicidade e maravilha desta ideia se fez a primeira «Tábua de Pesos Relativos das Partículas últi-

mas de Corpos gasosos e Outros», como ele próprio lhe chamou, reconhecendo tratar-se de assunto inteiramente novo, tanto quanto lhe era dado saber. Esta Tabela apresentou-a Dalton numa Memória lida na Sociedade Literária e Filosófica de Manchester, em 1805. Dela constavam, ao todo, vinte e um átomos, simples, uns; compostos, outros.

Três anos mais tarde, Dalton publicaria uma outra Tabela de pesos atômicos formada de vinte átomos simples e dezassete átomos compostos. Com ela, publicava também os princípios que o haviam guiado na determinação do número de átomos presentes em qualquer átomo composto, base imprescindível do cálculo dos pesos relativos dos átomos componentes, deduzidos de dados de análise gravimétrica de que dispunha. Esses princípios outros não são que os emergentes da sua regra de simplicidade (11).

3. Simplicidade e verosimilhança em Karl Popper

No quadro específico da Ciência Moderna, que em Francisco BACON (1561-1626), Barão de Verulam, reverencia «o maior, mais universal e mais eloquente dos filósofos» (14) pela consagração que fez do empirismo racional, o caminho de que dispõem as ciências da Natureza para descobrir a verdade e a experimentação seguida da indução. No seu domínio, o cientista vive do recurso à observação cuidadosa e à experimentação para se certificar dos factos e para os ordenar o mais perfeitamente possível. Desse recurso nascem as hipóteses que visam explicar os factos observados e sua interconexão; e nele elas se testam, no desejo de se arvorearem em leis com carácter universal.

Como ciência experimental que é, este é o método fundamental em que se tem firmado e desenvolvido o labor científico da química, de Lavoisier a nossos dias. As leis e teorias em que esta ciência se sistematiza são tentativa de explicação de factos conhecidos e tem por referência constante, como teste de verosimilhança e eficácia, a previsão e coadunação com novos factos, na certeza de que todo e qualquer facto cuja explicação se lhes escape é ferida letal que pode definitivamente lavar sua sentença de morte de modo inapelável.

Toda a controvérsia filosófico-científica suscitada pela Mecânica Quântica, no primeiro quartel do nosso século, com sua interpretação estatística das leis em que se generaliza o conhecimento factual, não afectou minimamente o empirismo racional herdado de Bacon. Significativa e digna de aqui ser citada é a afirmação de Dirac: «o único objectivo da Física Teórica é calcular resultados que possam ser comparados com dados experimentais» (15).

Todavia, os anos que se seguiram a essa controvérsia seriam marcados por forte contestação ao método indutivo do Barão de Verulam. Está na sua origem a obra *The Logic of scientific Discovery* de Karl Popper, primeiramente publicada em Viena de Áustria, no Outono de 1934, ainda que traduzida para inglês só em 1959 (16). Ressoavam então, ainda, as provocadoras afirmações de Willstatter: «penso não ser importante para um cientista que a sua teoria se venha a revelar correcta ou não. As nossas experiências não são realizadas para decidir se estamos certos ou errados, mas sim para aprofundar os nossos conhecimentos. Se lavramos e semeamos, desbravando o campo científico, é meramente por desejo de conhecimento. Não é de mo-

do algum inglório ter errado nas teorias e hipóteses com que se avançou» (17).

Na sua obra, Popper faz cerrada crítica do método indutivo, propondo que ele deve ser eliminado das chamadas ciências experimentais e substituído por um método de cariz dedutivo de que aponta os traços fundamentais. O ponto de partida das suas críticas é claro: a conclusão de uma indução não é deduzível das premissas de que dispõe, e pode vir a revelar-se falsa mesmo quando todas essas premissas sejam verdadeiras. Os princípios universais não estão contidos em princípios singulares, pois os ultrapassam; podem, porém, ser radicalmente contraditos por estes. E exemplifica com toda a objectividade: se observamos um milhar, um milhão, vários milhões que sejam, de corvos verificando que todos eles, sem excepção alguma, são pretos, não nos será lícito afirmar categoricamente **Todos os Corvos são Pretos**.

Poderá muito bem acontecer que em algum bem recôndito lugar do mundo, haja algum corvo de outra cor. E um só que ele seja é suficiente para deitar totalmente por terra aquela afirmação geral que tinha por trás de si, a suportá-la, longos milhões de observações exactas e incontestadas!...

Os gases raros considerados gases «inertes», e os alcanos considerados «parafinas» (do latim *parum affinis* — pouca afinidade) são apenas dois desses muitos «todos os corvos são pretos» que a química tem conhecido. Reacções do tipo $\text{Cl}_2 + \text{CH}_3\text{COOH} \rightarrow \text{ClCH}_2\text{COOH} + \text{HCl}$ foram tidas durante muitos e muitos anos como autênticas «impossibilidades» por implicarem a substituição de um átomo electropositivo por um átomo electronegativo. A mera síntese do ácido cloroacético, por Dumas e Laurent, foi quanto bastou para deitar por terra as generalizações em que se traduziam essas «impossibilidades». Com pouco mais que uma penada, a *teoria da metalépsia ou teoria unitária* de Dumas substitua a *Teoria dualística* de Berzélius de que decorria a defesa daquelas «impossibilidades» (18). Considerando a indução uma inferência defeituosa do ponto de vista lógico, Popper propõe uma metodologia de investigação científica de tipo dedutivista que tem por ponto de partida um conjunto de *meras hipóteses ou conjecturas*, cuja formulação original poderá ter tomado ou não como base dados e/ou observações de tipo experimental. O procedimento científico consiste então num exame crítico das implicações dessas hipóteses ou conjecturas iniciais, tentando infirmá-las a todo o custo. A sua credibilidade científica está na resistência que elas ofereçam ao denodado esforço de revogação que contra elas é movido. Assistir-lhes-á real valor científico na medida em que façam previsões potencialmente falsificáveis, mas que resistam a toda e qualquer tentativa de falsificação.

A um edifício científico feito de leis afirmadas como hipóteses confirmadas pela experiência com base na indução, Karl Popper contrapõe assim um edifício feito de hipóteses de trabalho sujeitas ao teste de falsificabilidade em todas as suas implicações. O valor científico da afirmação «todos os corvos são pretos» não está no facto de se apoiar sobre um milhar ou um milhão de observações, mas antes no facto de se tratar duma afirmação que pode ser invalidada pela simples observação de um só corvo que não seja preto, caso todos os esforços envidados para encontrar essa espécie de corvo redundem vãos.

Do mesmo modo, o valor científico de um novo processo de síntese de dado composto, relatado na mais

conceituada revista científica, não lhe advém, em última instância, do facto de ter o parecer favorável de críticos julgados altamente competentes no assunto, nem sequer do facto de poder ser comprovado por outros investigadores, noutros laboratórios. O procedimento de uns e outros poderá ser afectado por informação defeituosa! E porque *errare humanum est*, nem o mais sagaz e inteligente dos homens está livre de cair em involuntários erros! O seu valor científico será sim tanto maior quanto se trate de processo rico em consequências falsificáveis mas que resistam a toda e qualquer tentativa de falsificação encetada por quaisquer grupos de investigadores.

Mais do que passíveis de confirmação, os princípios básicos, em si e nas suas consequências, de uma teoria são antes passíveis de refutação. Uma teoria estará tanto mais certa quanto mais difícil seja, em casos específicos, demonstrar que está errada (19).

Porque o valor científico de uma teoria reside na falsificabilidade das implicações que contém, não há teorias que se possam reclamar categoricamente de verdadeiras, pois a sua falsificabilidade é questão em aberto por toda a eternidade. E é neste ponto que deparamos com o *problema da simplicidade* em Karl Popper.

Perante duas ou mais teorias em que nenhuma delas pode reivindicar pura e simplesmente o estatuto de ter consigo a verdade, por qual optar?

Na resposta a esta questão, a epistemologia de Popper assume-se como uma epistemologia evolucionista: o desenvolvimento do conhecimento científico é um processo de constante tentativa e erro, *em que sobrevivem as teorias mais aptas*.

E quais são estas?

As *mais verosímeis*; as *mais simples*, responde Karl Popper.

Para ser falsificável, uma teoria deve ser logicamente precisa, e não ambígua. Por isso, assiste maior grau de verosimilhança às teorias cuja falsificabilidade de seus princípios resistiu com êxito a maior número de provas no sentido de as infirmar. Dado o avanço sempre crescente do conhecimento científico, natural é que, relativamente ao passado, o presente disponha de maior número de elementos que sirvam de «provas de fogo» para testar a falsificabilidade. Natural é, pois, também, que as teorias mais recentes, desenvolvidas e aliçadas no justo apreço dessas «provas de fogo», tenham maior grau de verosimilhança que as antigas, onde o salto no escuro foi maior e, portanto, mais arriscado.

Por outro lado, quanto mais simples for uma teoria mais difícil será infirmá-la; serão menos seus «calcanhars de Aquiles» e menos serão também os flancos por onde possam atingi-la seus adversários. Menos vulnerável, assistir-lhe-á maior grau de verosimilhança.

Por simplicidade deve entender-se aqui a chamada *simplicidade semântica*, em contraposição à chamada *simplicidade linguística* e também à chamada *simplicidade pragmática*, embora se trate de três conceitos de simplicidade estritamente relacionados entre si, numa relação fundamentalmente complementar. Por *simplicidade semântica* de uma teoria entende-se a sua generalidade, isto é, uma *compreensão predicativa mínima* a que corresponderá, naturalmente, uma *extensão máxima*. O «generalista» sabe pouco (compreensão restrita) de tudo (vasta compreensão); o especialista sabe «tudo» (compreensão vasta) de muito pouco (extensão restrita). Uma teoria específica é menos simples (mais complexa) que um teoria geral. Esta está mais apta pa-

ra sobreviver do que aquela (20). Porque mais geral, a Mecânica Relativista de Einstein goza de maior grau de verosimilhança do que a Mecânica Clássica de Newton, como goza de maior verosimilhança a lei de atracção universal por este formulada quando contrastada com as leis de Galileu e as leis de Kepler que consideravam tão somente a gravitação entre planetas. Na sua vastidão, a teoria de Newton engloba as teorias de Galileu e Kepler. São as mesmas as leis que presidem aos fenómenos terrestres e aos fenómenos celestes; as leis que presidem aos fenómenos galácticos e as que presidem aos fenómenos atómicos. Tornava-se definitivamente obsoleta a distinção de Aristóteles entre um mundo sub-lunar e um mundo supra-lunar regidos por leis diferentes! Mais tarde, desenvolver-se-iam as teorias de Fresnel e Faraday que seriam extensivamente absorvidas pelas teorias de Maxwell. Mais tarde ainda, a Mecânica Relativista de Einstein englobaria, na sua extensão, as teorias de Newton e Maxwell.

É no contexto desta ideia de simplicidade como um *mínimo de compreensão* conceptual, correlativa da ideia de universalidade como um *máximo de extensão* que uma das características fundamentais das leis da natureza é a sua *universalidade e simplicidade*, como expressamente o nota, por exemplo, Pagels no seu livro *O Código Cósmico* (ref. 21, pg. 384).

E ocorre lembrar aqui que a teoria heliocêntrica de Copérnico, marco capital de toda a Revolução científica de que nasceu a Ciência Moderna, antes de se impor como um sistema apoiado em observações experimentais, se impôs pela simplicidade de que se revestia. Os calendários elaborados com base na teoria geocêntrica de Ptolomeu revelavam-se tão exactos e práticos quanto os elaborados com base nas novas teorias heliocêntricas. Porém, os cálculos baseados na teoria geocêntrica exigiam a consideração de 83 epiciclos e círculos diferentes para descrever apropriadamente o movimento dos astros então conhecidos; a teoria heliocêntrica de Copérnico não precisava de considerar mais que dezasseis, simplificando drasticamente o sistema de cálculo! Obviamente, não é pacífica a problemática suscitada por este método dedutivo proposto por Popper. Qualquer dos três pilares em que assenta, o *critério de falsificabilidade*, o *teste de simplicidade* e o *teste de verosimilhança*, têm sido objecto de forte contestação. Se mais não fosse, porque eles põem em causa, para usar a terminologia de T. Kuhn (22), a investigação de base paradigmática assente no empirismo racional de F. Bacon. E, como o nota o próprio Kuhn, na adopção de um novo paradigma surge um período de crise a que é inerente natural «mal-estar» que se caracteriza por o antigo paradigma já não servir e não haver ainda consenso sobre o novo. A Popper se opuseram duramente Feyerabend (23), Putnam (24), e outros (25).

De realçar das críticas destes seus oponentes que a evidência crucial de que se reclama o critério da falsificabilidade à qual basta um só facto que seja, nem sempre se poder arvorar em sentença definitiva. Se *contra factos não há argumentos*, é possível aduzi-los contra a sua interpretação e/ou alcance. Quer dizer, a «evidência dos factos» é também ela falível, sujeita a mal-entendidos e mal-interpretações, a impor, muitas vezes, rotunda reconsideração. Prova-o a história da hipótese de Avogadro, a história da Teoria dos germes de Pasteur, a história da Teoria anti-flogística de Lavoisier, etc., onde é patente que os mesmos factos, interpretados de modo diferente, serviam igualmente bem de argumento para os grupos adversários.

Do ponto de vista pedagógico, a metodologia científica proposta por Popper não é favorável à criação duma «ciência normal» de base paradigmática, tranquilamente votada — para usar uma vez mais a terminologia de Kuhn — não à descoberta de novas teorias ou explicações, mas à confirmação da que adoptou, em actividade que mais não é que proceder a aplicações e resolver problemas previstos ou previsíveis no âmbito paradigmático, por recurso ao paradigma que toda a comunidade científica aceita.

Enredado nos quadros de uma «ciência normal» deste tipo, o cientista tudo fará para manter a ciência no regime em que se enquadrou; seduzi-lo-á descobrir novos factos e interpretar novos fenómenos que confirmem e se enquadrem no paradigma em que se move. E não é sem certo mal-estar que depara com «anomalias», ao lado das quais muitas vezes preferiria passar, e sempre tentado a pôr de lado ou esquecer. O paradigma em que se formou e trabalha é a «regra do jogo» da investigação que conduz e que não gostará de boamente ver posta em causa. Factos que se não enquadrem nela são sentidos como algo que falhou ou está errado e, consequentemente, que não é visto com bons olhos, nem benquisto.

Mais empenhada em procurar factos que denunciem possíveis falhas num argumento de preferência a factos que suportem a evidência de uma teoria de antemão aceite, a metodologia proposta por Popper deixa ao investigador um maior sentimento de liberdade: os factos em si-mesmos nunca são factos «errados», surpreendentes, malquistos. Na sua linguagem simples são igualmente bem aceites no caso de infirmarem ou não as conjecturas ou hipóteses de que se partiu, porque lhes assenta igualmente bem a dupla função de infirmar ou confirmar (26).

Mais importante ainda do que libertar o investigador do mal-estar em que se possa traduzir o deparar com factos que se não coadunem bem com o paradigma científico em cujas malhas se move, a metodologia de Popper aponta-lhe como sentido de marcha a formulação de teorias e/ou leis cada vez mais simples. E o caminhar ao encontro da simplicidade da natureza de que as leis e/ou teorias mais não devem ser que expressão matemático-verbal.

Simplisticamente (que não simploriamente!) diríamos que essa metodologia aponta aos cientista o rumo implícito no Segundo Princípio da Termodinâmica: irreversivelmente, o universo evolui para um estado de maior entropia, a que corresponde maior diversidade, maior separação das coisas que o constituem. Do *Uno* em que estavam todas as coisas, evolui para o *diverso* em que separadas entre si, cada uma delas melhor se mostra, revela e aparece na simplicidade do que é.

Neste sentido, é fecho apropriado para as considerações sobre simplicidade e verosimilhança em química que aqui deixamos, uma célebre declaração de Edington, em que o Segundo Princípio da Termodinâmica é aduzido como condição *sine qua non* de verosimilhança duma qualquer teoria: «o princípio de que a entropia do universo aumenta sempre — o Segundo Princípio da Termodinâmica — ocupa, em minha opinião, a posição suprema entre as leis da Natureza. Se alguém lhe fizer notar que a sua teoria favorita do universo está em contradição com as equações de Maxwell, então, tanto pior para as equações de Maxwell! Se a teoria estiver em contradição com resultados experimentais, bem, os experimentalistas muitas vezes confundem as coisas! Mas se a sua teoria estiver em contradição com

o Segundo Princípio da Termodinâmica, não posso dar-lhe qualquer esperança; a sua teoria não tem qualquer futuro e está votada ao colapso em profunda humilhação» (27).

NOTAS

- 1 — J.A. Thomson, *Introdução à Ciência* (Ed. Arménio Amado, Coimbra, 1941), pp. 44-45.
 - 2 — E. Teller, *The Pursuit of Simplicity* (Malibú, Califórnia, *Pepperdine University Press*, 1980).
 - 3 — I. Newton, *Philosophiæ Principia Mathematica* (First Edition, London, 1687), *Lib. III: Regulae Philosophandi, Hypoth. I*: «não se devem admitir como causas das coisas naturais senão causas que sejam verdadeiras e apenas tantas quantas bastem para explicar os seus fenómenos. Com efeito, a Natureza é simples e não se luxúria com causas superfluas para as coisas».
 - 4 — I. Hart, *Makers of Science, Mathematics, Physics, Astronomy* (Oxford University Press, New York, 1924).
 - 5 — R. Descartes, *Discours de la Méthode* (Leyden, Ian Maire, 1637).
 - 6 — Quão simples são dois grandes pilares da Mecânica de Newton e da Teoria da Relatividade de Einstein sintetizados nas fórmulas $F=ma$ e $E=mc^2$!
 - 7 — P. Walden, *J. Chem. Educ.*, 29, 386 (1952).
 - 8 — J.R. Partington, *Historia de la Química* (Espasa-Calpe, Buenos Aires, 1945), pg. 182.
 - 9 — (a) M. Gorman, *J. Chem. Educ.*, 37, 100 (1960); (b) E. N. Johnson, *J. Chem. Educ.*, 37, 267 (1960).
 - 10 — O facto de Dalton se referir à sua teoria atómica pela primeira vez, em público, num trabalho em que estudava a solubilidade de diferentes gases em água, não significa que a tenha desenvolvido com base nesse mesmo estudo. A problemática que terá servido a Dalton de verdadeiro ponto de partida para o estabelecimento de tal teoria é ainda hoje questão polémica, sem relevo de maior para as considerações aqui tecidas. Por isso, relativamente a ela, limitamo-nos a remeter o leitor interessado para: (i) — T. Thomson, *The History of Chemistry, Vol. II* (London, 1831); (ii) — W.C. Henry, *Mémoires of the life and Scientific Researches of John Dalton and* (London, 1854); (iii) — R.A. Smith, *Mémoire of John Dalton and History of the Atomic Theory up to his time* (Manchester Mémoires, 13, pp. 1-298, 1856); (iv) — H.E. Roscoe and A. Harden, *A New view of the origin of Dalton's Atomic Theory* (London, 1896); (v) — A. N. Meldrum, *Avogadro and Dalton: the standing in Chemistry of their hypothesis* (Edinburgh, 1906); (vi) — J.R. Partington, *Short History of Chemistry* (London, 1937); (vii) — L.K. Nash, *The atomic molecular theory* (Cambridge, Mass., 1950); (viii) — A. Thackray, *John Dalton. Critical Assesments of his Life and Science* (Cambridge, Mass., 1972); (ix) — T. Cole Jr., *Dalton, Mixed Gases and the Origin of the Chemical Atomic Theory* (Ambix, 25, pp. 117-130, 1978).
 - 11 — J. Dalton, *New System of Chemical Philosophy* (Manchester, 1808-1810), Vol. I, Part. I, pp. 211-220; A.J. Bernatowicz, *J. Chem. Educ.*, 47, 577 (1970).
 - 12 — J. Dalton, *O. cit.*, pp. 131 e 223.
 - 13 — J. Korn, *Átomo* (Ed. Verbo, Lisboa, 1963), pg. 15.
 - 14 — J.R. D'Alembert in *Encyclopédie ou Dictionnaire Raisonné des Sciences, des Arts, des Métiers* (Lucques, Paris, 1758-1776).
 - 15 — Citado in *Editor's Outlook*, *J. Chem. Educ.*, 8, 209 (1931).
 - 16 — K.R. Popper, *The Logic of Scientific Discovery* (Basic Books Inc., New York, 1959).
 - 17 — R. Willstatter, *From my Life* (Trad. L. Hornig, W.A. Benjamin, 1965), pg. 385.
 - 18 — J.R. Partington, *O. cit.*, pp. 254-255.
 - 19 — Antes de Karl Popper, já vários defensores do positivismo em Física haviam pugnado por um método de trabalho em que a aceitação pura e simples do método indutivo de Bacon era, de algum modo, posta em causa. Ernst Mach (1838-1916), um dos criadores do chamado *empiricriticismo*, ensinara que aos físicos assistia o direito de usar ideias e princípios não inferidos necessariamente da experiência, embora salientasse que não deveriam perder-se com ideias a que não pudesse ser dado um significado concreto e preciso através de operações experimentais.
- E o chamado *método postulacional de Einstein* seguira na mesma linha ao defender que o cientista, embora partindo do mundo da experiência e das experiências, pode e deve usar da sua intuição física para saltar destas para a abstracção de postulados absolutos, num salto conceptual muitas vezes muito para além daquilo que qualquer experiência possa verificar e antes de ter quaisquer dados que o possam apoiar. Os postulados absolutos não podem ser deduzidos racionalmente a partir da experiência, uma vez que a transcendem. A intuição é a base da sua invenção. Textualmente, Einstein afirmava: «para a criação de uma teoria, a mera colecção dos fenómenos registados nunca chega; deve sempre ser acrescentada uma invenção livre

do espírito humano para atacar o coração do problema» (cf. 21, pp. 67-68). Estabelecidos esses postulados, o cientista utiliza-os para deduzir resultados teóricos específicos que possam ser experimentalmente verificados. Se uma experiência contrariar os resultados teóricos, destruirá também o postulado em que eles se fundamentam. Tal como na filosofia de K. Popper, esta vulnerabilidade dos postulados absolutos à falsificação faz parte integrante do método.

Sobre este mesmo assunto, refira-se aqui a polémica de que se fizeram eco as colunas da revista *Nature*, em 1937, a propósito de *Modern Aristotelism* (*Nature*, May 1937, pp. 784 ss); *On the origin of laws of nature* (*Nature*, June 1937, pp. 997 ss); *Physical Science and Philosophy* (*Nature*, June 1937, pp. 1000 ss); e *Deductive and Inductive methods in Science* (*Nature*, June 1937, pp. 1001 ss).

20 — Quando definimos *animal* como *ser vivo sensível*, construímos um conceito em que o número de notas predicativas é três; quando definimos *homem* como *animal racional* (isto é, *ser vivo sensível racional*), elaboramos um conceito em que o número de notas predicativas é quatro. Do primeiro conceito para o segundo há pois, um aumento da compreensão; nesse mesmo sentido diminui a extensão: dentro do conceito de animal estão todos os indivíduos que caem

sob o conceito homem e ainda todos os animais irracionais. A maior vastidão do conceito animal corresponde mais fácil análise da falsificabilidade das implicações definidas por sua compreensão o que permite que mais facilmente se revista de maior grau de verosimilhança.

21 — H.R. Pagels, *O Código Cósmico* (Ed. Gradiva, Lisboa, 1986).

22 — T.S. Kun, *The Structure of Scientific Revolutions* (University of Chicago Press, Chicago, 1962).

23 — P.K. Feyerabend in *Scientific Revolutions* (Ed. I. Hacking, Oxford University Press, 1981), pp. 160 ss.

24 — H. Putnam in *Scientific Revolutions* (Ed. I. Hacking, Oxford University Press, 1981), pp. 66 ss.

25 — J. Agassi, *Mind*, 90, 576 (1981); J. Kotarbinska in *Logic, Methodology and Philosophy of Sciences* (Ed. E. Nagel, P. Suppes and A. Tarski, Stanford University, Califórnia, 1962) pp. 265-274.

26 — G.F. Williams, *Educ. Chem.*, 16, 102 (1979); W. Derkse, *J. Chem. Educ.*, 58, 565 (1981); F.M. Akeroyd, *J. Chem. Educ.*, 61, 697 (1984).

27 — A.S. Edington, *The Nature of the Physical World* (University Press, Cambridge, 1928).

Eléctrodo padrão de hidrogénio construído no laboratório com H₂ produzido *in situ*

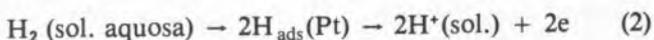
O eléctrodo padrão ou normal de hidrogénio «ENH» é univelsalmente reconhecido como um dos melhores eléctrodos de referência, tendo sido adoptado como padrão primário em relação ao qual o potencial de outros eléctrodos é medido.

O eléctrodo normal de hidrogénio pode ser, em princípio, considerado como um eléctrodo de oxi-redução em que o equilíbrio é estabelecido entre os electrões do metal nobre, a Platina, os iões H⁺ em solução e o hidrogénio molecular dissolvido. A actividade do H₂ molecular é normalmente uma variável independente, função da pressão parcial do hidrogénio gasoso em contacto com a solução aquosa. Por analogia, com outros eléctrodos de oxi-redução, o potencial do eléctrodo de hidrogénio é descrito pela equação,

$$E = E^{\circ} + \frac{RT}{2F} \ln \frac{(a_{H^+})^2}{P_{H_2}} \quad (1)$$

em que, E^o designa o potencial padrão e ao qual foi atribuído por convenção o valor de 0,000V, qualquer que seja a temperatura. Ficou assim estabelecida uma escala de potenciais electroquímicos de oxi-redução — a **escala do hidrogénio** —.

Porém, o verdadeiro equilíbrio no eléctrodo de hidrogénio é descrito por,



o que significa que a Pt não intervém apenas como agente que recebe ou dá electrões, mas também como um catalizador do processo global, daí que se use platina platinizada.

Numerosas configurações têm sido propostas e executadas para o eléctrodo de hidrogénio¹; contudo, ele não é ainda hoje um eléctrodo comercializado, nem sequer um eléctrodo frequentemente utilizado no labo-

ratório, como referência. Poderá argumentar-se que existem outros eléctrodos de referência, já comercializados, de fácil manuseamento e cujo potencial é aferido em relação ao ENH. Só que, muitos são os estudos que por diferentes razões requerem a utilização de um eléctrodo de hidrogénio, por ex. como eléctrodo de referência.

Coloca-se então a questão: Quais os factores que têm contribuído para a utilização tão pouco frequente do ENH?

Ora, o eléctrodo convencional de hidrogénio, tal como foi concebido, requer a utilização de H₂ gasoso e puro em contacto com uma solução aquosa ácida (a_{H⁺} = 1). O H₂ gasoso é geralmente fornecido em garrafas de gás comprimido, sendo necessário todo um conjunto de acessórios, como tubos, válvulas, manómetros, etc., para conduzir o H₂ ao compartimento que contém a solução aquosa. Neste percurso o H₂ pode ainda sofrer facilmente contaminação, requerendo do experimentador cuidados especiais de manuseamento. Questões de segurança são também um factor de não somenos importância, já que se trata de H₂ (gás altamente combustível e que forma com o ar misturas explosivas).

Algumas tentativas têm sido feitas no sentido de se «fabricarem» eléctrodos de hidrogénio com H₂ produzido «*in situ*»²⁻⁴. Conceber os referidos eléctrodos, é em princípio fácil, já que o H₂ pode ser facilmente produzido por electrólise da água ligeiramente acidificada. Porém, a construção de um eléctrodo baseado naquele princípio satisfazendo aos requisitos de um eléctrodo de referência, com um tempo de vida razoável e transportável, pelo menos no espaço de um laboratório, não tem sido facilmente conseguido.

Na fig. 1 mostra-se o esquema de um eléctrodo de hidrogénio concebido e executado na Universidade de Southampton e utilizado no projecto de Electrocatálise que decorre no CECUL, em colaboração com o Dr. D. Pletcher, daquela Universidade.

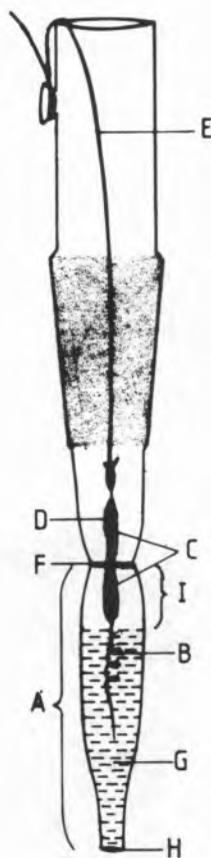


Fig. 1

Esquema de um electrodo de hidrogenio com H_2 produzido *in situ*.

- A — reservatório em vidro pyrex
 B — fio de Pt platinizado
 C — vidro fundido
 D — fio de Pt
 E — fio de cobre
 F — camada de vidro fundido que isola hermeticamente o compartimento (A) do exterior
 G — solução aquosa contendo iões H^+ e H_2 dissolvido
 H — orifício com um diâmetro de 2 mm
 I — camada de H_2 gasoso produzido por electrólise.

1. Construção do electrodo

A espiral B é feita de um fio de platina com 1 mm de diâmetro e com aproximadamente 2 cm de comprimento. A 1.^a etapa no sucesso do electrodo pertence ao técnico de vidro, que «solda» a hélice de Platina a outro metal menos nobre, (o condutor externo (E)), de modo a que a hélice de Pt fique no compartimento (A) — que tem que ser hermeticamente fechado, para que não haja a mínima hipótese de fugas. A Platina é «soldada» ao metal externo através do vidro pyrex, a uma temperatura ideal, para que se dê a fusão da Pt e do vidro. A hélice de Pt foi platinizada, seguindo o procedimento indicado por Hills e Ives⁵.

2. Preparação do electrodo

Na sua parte inferior o compartimento (A), termina por um orifício cujas dimensões são críticas no funcionamento do electrodo. Com uma certa arte e experiência é possível encher facilmente o compartimento (A) com uma solução aquosa, convenientemente desarejada (por ex. 0,5M H_2SO_4 ou 1M $HClO_4$ aquoso), sem deixar vestígios de bolhas de ar.

Em seguida, procede-se à electrólise, utilizando para o efeito outro electrodo auxiliar de Pt, estando os dois electrodos mergulhados numa célula em U em comparti-

mentos separados por uma placa porosa. A célula é cheia com a mesma solução que foi utilizada para encher o electrodo. A densidade de corrente utilizada para a electrólise pode variar entre 100 a 200 mA cm^{-2} de tal modo a que a evolução de H_2 não seja nem demasiado rápida nem muito lenta. O O_2 libertado durante a electrólise não deve passar para o interior do electrodo de referência. Interrompe-se a electrólise quando cerca de 1/3 do electrólito no compartimento (A) tenha sido substituído por H_2 gasoso o que acontece num intervalo de 1-3 minutos aproximadamente. Transfere-se então o electrodo preparado para um célula em U, cheia com o mesmo electrólito. Deixa-se o sistema em repouso, durante cerca de 5 a 10 minutos.

3. Teste de funcionamento do ENH preparado em 2.

Mede-se o potencial em relação a outro electrodo de referência por ex. o electrodo comercial de calomelanos, utilizando para o efeito um multimetro electrónico de alta impedância. Se porém, o electrólito utilizado tiver sido uma solução aquosa de $HClO_4$ de concentração 0,5M em vez de 1M o valor do potencial medido não será de 0,244 V vs. ESC mais sim aquele valor acrescido do termo correctivo de acordo com a equação (1). Se o potencial medido, for muito diferente do valor esperado, então é aconselhável repetir a operação de enchimento e electrólise.

Em geral, ao fim de aproximadamente 20 minutos o potencial do electrodo mantém-se constante dentro do intervalo $\pm 0,2mV$.

4. Tempo de vida

Um electrodo assim preparado pode manter-se estável durante um período de 8 dias ou mesmo mais. Pode acontecer, também, que dure apenas algumas horas. De entre os muitos factores que parecem contribuir para um tempo de vida mais ou menos longo, temos a pureza das soluções, a composição das próprias soluções em que é mergulhado o electrodo, o intervalo de polarização a que é submetido, o grau de agitação do sistema e ainda a oxigenação da solução.

As quedas de potencial quando se verificam, são em geral bruscas, logo facilmente detectáveis seja qual for o sistema em estudo.

5. Manutenção de electrodo

Quando não em serviço, o electrodo deve ser mantido na posição vertical num compartimento de vidro contendo uma solução aquosa ácida de elevado grau de pureza.

Eis um método económico e seguro de preparação de um electrodo normal de hidrogenio, electrodo que tem provado ser um bom electrodo de referência.

REFERÊNCIAS

- Ives, D.J.C. and Janz, G.J. «Reference Electrodes», Academic Press, London (1961).
- Giner, J., J. Electrochem. Soc., 111 (1964) 376.
- Will, F.C. and Hess, H.J., J. Electrochem. Soc., 120 (1973).
- Will, F.G. J. Electrochem. Soc., 110 (1963) 145; 110 (1963) 152; 133 (1986) 454.
- Hills, G.J. and Ives, D.G.J., J. Chem. Soc. (1951) 305.

Inês T.E. Fonseca

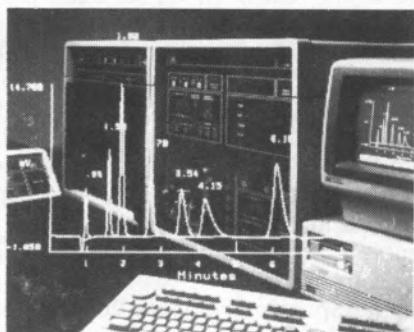
CECUL (INIC), Rua da Escola Politécnica, 58,
1294 Lisboa Codex, Portugal.



DIAS DE SOUSA LDA

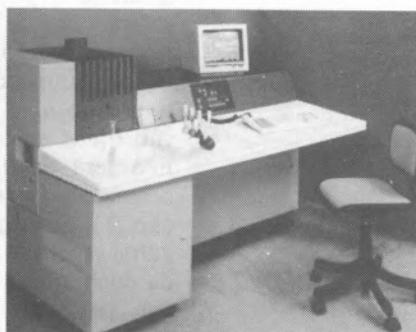
INSTRUMENTAÇÃO ANALÍTICA

Distribuidores exclusivos em Portugal de:



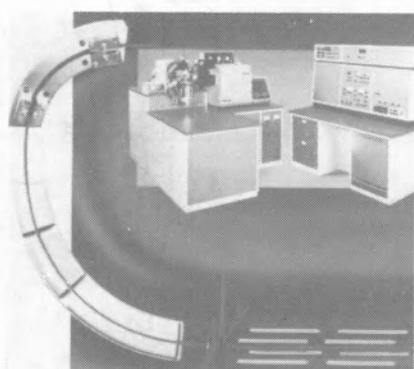
Cromatografia Iónica

DIONEX



Espectrometria de Emissão

**JOBIN
YVON**



Espectrometria de Massa

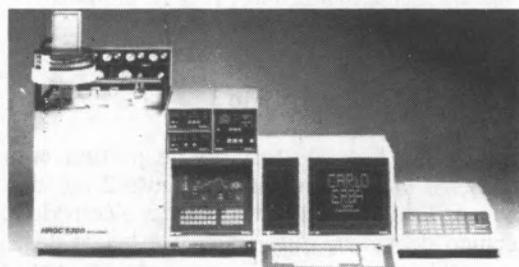
**KRATOS
ANALYTICAL**



Cromatografia HPLC

Integradores-Registadores computadorizados

Spectra-Physics



Instrumentação Científica

**CARLO ERBA
STRUMENTAZIONE**

Ao vosso serviço com Seriedade, Apoio Técnico e Analítico especializado, Enquadramento laboratorial.

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 12 - 1.º D.
2625 PÓVOA DE STA. IRIA
TEL. (01) 259 23 16 - 259 24 09
TLX. 43926 DISO P

PRAÇA PEDRO NUNES, 94
4000 PORTO
TEL. (02) 93 14 99 - 93 38 09
TLX. 26250 NSC P

Espectroscopia

— algumas ideias

J.C. Conte ^a

Parte I

1. Prólogo

Este é o primeiro de uma série de textos que me proponho escrever sobre assuntos de espectroscopia, a pedido do actual Director do Boletim. E precisamente por isso sinto que devo explicar o que penso fazer. Dizer o como e o porquê, qual a ideia que serve de fio a isto, e mesmo em que qualidade me apresento para o fazer.

Em termos profissionais desde há muito que estou ligado a questões de Espectroscopia. Sou investigador do INIC e faço investigação no domínio da Química Física Molecular (estudo de propriedades de moléculas orgânicas fluorescentes). No âmbito da Universidade estive até há pouco tempo ligado à cadeira de Espectroscopia.

Já passaram alguns (largos) anos desde que me formei, desde que obtive o meu doutoramento, desde que comecei a dar aulas de Espectroscopia. Foram vários os livros que li, as conversas que tive, as aulas que orientei. De tudo isso recolhi experiência, amadureci ideias. Considero que chega uma altura da vida em que tudo isso, amalgamado, dá uma espécie de visão nova das coisas.

Por outro lado essa nova visão é como que um transbordar de um copo cheio. E surge acompanhada de um vivo desejo de comunicação. É esta a primeira ideia deste texto. Comunicar. Entrar em contacto.

Mas entrar em contacto com quem? Quando telefonamos a alguém «escolhemos» o interlocutor. Uma conferência destina-se normalmente a um público determinado. Uma aula é dada a um dado grupo de alunos, que se sabe de onde vem e para onde vai. E aqui surge o pedido do Director do Boletim. O pedido de que eu escrevesse um texto essencialmente dirigido a professores do Ensino Secundário. Não é que eles sejam uma «raça» à parte. Mas é um público qualificado.

O assunto é, obviamente, a Espectroscopia. O motivo é a necessidade de comunicação. Falta falar no método. Proponho-me escrever, para já, uma série de três artigos sobre Espectroscopia.

No primeiro darei uma ideia sobre o que penso da Espectroscopia. No segundo tratarei das formas habituais da Espectroscopia. Será evidentemente o texto mais «clássico». No terceiro artigo escreverei sobre formas novas e novas correntes de Espectroscopia. Uma espécie de generalização. Não esperem grandes tiradas, nem muitas fórmulas nem muitos gráficos. Para isso há muitos e bons textos. E um espaço próprio. Eu sei que infelizmente falta um bom livro especializado em português. Talvez um dia me abalance a fazê-lo. Mas

não é aqui. Gostava que estes textos fossem uma espécie de conversa.

Ora uma conversa não é um monólogo. É uma comunicação. Entrecruzada. A palavra conversa é da família de conversação. Mudança. Depois de uma conversa já não somos, já não devemos ser, os mesmos.

Para conseguir esta conversa eu proponho o seguinte. Proponho que me escrevam. O tal «público» a quem me dirijo. Será que isto que eu vou escrever resulta? Será que eu consigo a tal comunicação que pretendo? Que me escrevam pois. Dizendo o que pensam sobre a Espectroscopia, que problemas têm ao expor aos vossos alunos as matérias relacionadas com a Espectroscopia. Qual a vossa visão sobre a Espectroscopia.

Esses elementos que eu espero receber serão assim a resposta à primeira parte da nossa conversa. E numa fase seguinte, depois de ter lido esses vossos dados, eu escreverei outros três textos, que serão por assim dizer uma nova versão dos primeiros. Enriquecido com as vossas ideias. Com a minha resposta, a minha chegada à nova fase. Uma segunda demão numa pintura.

E para terminar, escreverei um texto final constituindo um fechar de ciclo, com as conclusões. Conclusões sobre a validade da experiência mas acima de tudo com os resultados da experiência.

Devo dizer que eu não tenho contacto quase nenhum com os problemas que possa haver nas aulas de Espectroscopia ao nível do Ensino Secundário. Tenho comigo alguns livros. Há coisas de que gosto, outras de que não gosto. Há inclusivamente algumas com as quais não concordo.

Mas o que me interessa aqui sobretudo é o diálogo, a conversa, a comunicação. E por isso é importante a «resposta» a esta experiência. A vossa resposta. Se a não tiver não será conversa. Não será um transbordar de um copo, uma comunicação, mas um mero despejo. Estão definidas as coordenadas. Os géneros alimentícios foram comprados. Estão sobre a mesa. Agora é preciso preparar a refeição.

2. O que é a Espectroscopia?

Propuz uma conversa sobre a Espectroscopia. mas o que é a Espectroscopia? Nestas coisas, um bom método é ver o que é que o nome quer dizer. No saber antigo, dar o nome a uma coisa ou um ser é adquirir uma certa posse sobre essa entidade. É mesmo um dado bíblico. Deus fez os animais, diz a Bíblia, e disse ao homem que lhes desse o nome o que significaria que tomava posse sobre eles. A ideia de haver um nome de família é outro sintoma de que o nome é importante.

^a Investigador principal do INIC.

Pois bem. Espectroscopia tem a sua origem no grego e significa o estudo dos espectros. Mas que espectros? Fantasmas? Até certo ponto, isso até é verdade. Mas cuidado. É que espectro significa imagem.

A Espectroscopia é então o estudo de imagens. Mas que imagens? E imagens de quê? Eu quase diria: de tudo o que é coisa, ou ser, ou ideia. O problema pode e deve pôr-se, com toda a generalidade. Só assim teremos uma visão enriquecida.

Talvez se compreenda agora melhor o que eu disse atrás sobre a visão que eu tinha da espectroscopia e sobre o interesse que eu tenho nesta experiência.

O homem tem sede de conhecimento. A frase é habitual. E para aumentar o seu conhecimento normalmente ele «interroga», pesquisa, procura. Admitamos que eu encontro um amigo e que pelo seu ar ele me parece triste. E eu pergunto-lhe o que é que ele tem. Ele responde. Eu fico com uma ideia, construo uma «imagem» do estado em que ele se encontra. Pois bem, com isto eu realizei uma observação espectroscópica.

Se eu acordo mal disposto tento pensar, ou já sei, as razões da minha má disposição. Também aí eu construo uma imagem, também eu aqui fiz uma observação, uma operação espectroscópica.

Suponhamos que eu tenho comigo um sintonizador, uma telefonia. Rodo um botão. Para dadas posições há silêncio, para outras músicas várias, para outras palavras. Música ligeira, música clássica, um discurso e uma peça de teatro. Com o rodar do botão fiz uma observação espectroscópica. Fiquei com uma imagem do estado das ondas que «por aí andam» pela sala.

Reparem que aqui há um elemento que é novo. Eu precisei dum aparelho para me fornecer esses elementos. É que felizmente o meu sistema sensorial não está habilitado a fornecer-me directamente essa informação. E felizmente, digo eu, como é óbvio. Já imaginaram o que seria se nós ouvíssemos todas as emissões radiofónicas que poluem os ares? Talvez um dia se venha a descobrir que afinal essas ondas têm efeitos perniciosos. Pelo menos já hoje em dia se sabe que os infrasons têm efeitos perniciosos, e que o mesmo sucede às ondas de radar, por um lado, aos raios X por outro. Mas voltemos ao nosso assunto. Com o sintonizador eu fiz a observação espectroscópica do estado das «ondas de rádio» que estavam na sala. Tal como eu observo os móveis da sala. E reparem que também aí eu uso um sintonizador. Simplesmente esse está «incorporado» em mim. São os meus olhos. Eu vejo os móveis da sala. Movo os olhos, da esquerda para a direita, de cima para baixo, tal como rodo o botão. E vejo os livros, cada livro, as cadeiras, o candeeiro, a televisão. Como ao rodar do botão.

É a mesma coisa. Melhor, é quase a mesma coisa. Há aqui, repare-se, alguns elementos diferentes. Um é o facto que eu já referi de aqui o sintonizador já estar incorporado em mim. Se eu fosse cego não via. Mas há outra diferença, e grande. Os meus olhos são sensíveis (isto é, eu vejo), à chamada informação visível, à radiação da zona do visível que vem dos objectos.

Mas os objectos não emitem essa radiação. Assim é que se a sala estiver às escuras eu não vejo os objectos. Preciso de luz. Uma teoria antiga sobre a visão explicava o fenómeno dizendo que os olhos emitiam pequenos corpúsculos que «batiam» nos objectos e recolhiam aos olhos trazendo-nos a impressão nova. O que é certo é que eu preciso de luz para ver.

Ora em que é que o fenómeno consiste? É como quem faz uma pergunta. Eu ilumino a sala, a luz bate no

objecto. Ele reflecte a luz, e como é sabido, nem mesmo a reflecte toda e no caso geral até nem se deve dizer reflectir. Isto porque a luz que bate no objecto é «difundida», isto é, vai em todas as direcções. Eu podia fazer isto numa sala às escuras com uma lanterna de bolso que tem um feixe de luz que aponta. E tal como quem roda um botão, eu apontaria o feixe de luz da lanterna para a esquerda, para a direita, para cima, para baixo.

Há aqui um elemento que parece novo. Eu usei um feixe de luz. Isto é como quem faz uma pergunta. Eu pergunto a uma pessoa o que é que se passa com ela. E ela responde. Com isso eu construo uma imagem. Faço uma observação espectroscópica. Quando uso a lanterna, eu tenho a sala iluminada.

Podemos neste momento ir um pouco mais longe e perguntar com bom senso, a nós próprios, a pergunta essencial deste texto e desta secção: o que é isso de espectroscopia?

Permitam-me no entanto fazer aqui um parêntesis para dizer que talvez quem esteja a ler estas linhas comece a perceber o «método» que eu me propus usar para a conversa. Há tantas coisas de interesse a dizer sobre Espectroscopia. No fundo, no fundo, há tanta coisa de interesse por esse mundo que nós não sabemos descobrir... E por isso não sabemos comunicar. Por isso só sabemos ser agressivos. Mas isso é outra conversa. Voltemos ao assunto da Espectroscopia.

Se eu fizer incidir o feixe da lanterna ou, na sala iluminada olhar para a lombada de um livro na estante eu quando muito vejo o título do livro, e a cor da lombada. Não vejo o que está dentro evidentemente. Se eu perguntar a um amigo o que é que ele tem e ele não responde eu fico sem saber o que é que ele tem. Fico apenas a saber, porque vejo, o seu ar exterior. A «lombada».

Isto serve para mostrar que dispor de luz, ou fazer perguntas, não chega. O «objecto» a quem se pergunta tem que responder. Como o livro fechado. Não se diz o mesmo de uma pessoa? Que é fechada, que se fechou.

Precisamos de saber perguntar. O meio, o objecto, que usamos para perguntar tem que ser adequado. Como tem que ser adequado o «objecto» a quem se pergunta. Não é costume telefonar a um amigo, advogado, perguntando qual o remédio que se deve tomar para uma doença qualquer (a não ser que saiba que ele tem ou teve esse conhecimento, por estar informado, isto é, por ter essa forma).

Eu escrevi há pouco que ao ver um objecto via a sua forma, e via, normalmente a sua cor. E como todos podem prever, na minha sala eu tenho objectos de várias cores. O que é esta questão de cor? A explicação vem na sequência do que foi escrito. O objecto dá-me uma certa informação sobre o seu interior. Como é sabido há uma parte de luz que ilumina o objecto que é «absorvida», e uma parte que é difundida. A luz que incide tem várias «cores» e o que nós vemos e provém do objecto é por assim dizer a resposta do objecto. É o que ele quis dizer de si, a medida do grau em que ele se abriu ou se fechou.

Chegados a este ponto podemos tentar fazer um balanço e ver se já se pode responder à pergunta. O que é isso de Espectroscopia?

A Espectroscopia é o estudo dos espectros. Com uma análise, uma operação espectroscópica, nós construímos, para nosso conhecimento, uma imagem de um objecto, de um ser, dos outros, ou de nós. De uma

molécula, até. Para realizar uma operação espectroscópica não precisamos, evidentemente, de ter acesso ao objecto. Ele tem que estar disponível. No caso de uma pessoa às vezes é mais difícil. Há quem diga que para um negócio e mesmo para a política, um bom almoço é um bom método. Noutros casos e nesta sociedade, às vezes o dinheiro, dado com luvas (ou em luvas), para não deixar impressões digitais.

Mas precisamos do objecto. E não só! Precisamos de um detector que nos traduza a informação que o objecto nos dá. Isto exige que se saiba «interpretar» a informação. De que serve o livro de instruções em Japonês? (para mim, pelo menos).

Além do detector precisamos de um outro elemento. Eu chamar-lhe-ia o perguntar. O elemento que «atira» uma pergunta. A lâmpada, a luz, a minha voz a fazer a pergunta. Essa pergunta tem que ser adequada, ao objecto que tem que estar disponível, aberto, à pergunta, isto é, compreendê-la, e querer ou poder, responder. Tenho que usar uma linguagem adequada. Não serve de nada fazer no Japão, a pergunta do «quanto custa» em português.

Talvez agora já se tenha a resposta à pergunta inicial. O que é isso de Espectroscopia?

3. O que nos dá a Espectroscopia

Um primeiro ponto é uma espécie de verdade do Amigo banana. A resposta é em princípio a resposta a uma pergunta. E assim a informação que recebemos é a que pedimos. Pelo menos é assim que deverá suceder num mundo ajuizado. É isso que nós esperamos a todo o momento. Às vezes as coisas saem trocadas. Como se costuma dizer, às vezes temos a resposta que merecemos e não a resposta que queremos. Muitas vezes temos a resposta que é a verdadeira e não a que pensamos que íamos receber. Sucede muitas vezes isso com um computador, como é sabido.

Num estudo normal de espectroscopia as coisas são geralmente mais normais. Normalmente nós «perguntamos» a uma molécula uma determinada informação sobre a propriedade. Para isso usamos uma «pergunta» adequada. Para facilitar as coisas normalmente esse «perguntar» é acompanhado de um tradutor de resposta. É o chamado detector. O equivalente à telefonia.

É claro que se o que perguntamos é para aumentar os nossos conhecimentos, o que interessa é não perder tempo. Fazer a pergunta adequada, ao objecto adequado e tendo a certeza, ou quase, que sabemos interpretar a informação (o que não quer dizer que saibamos «perceber»).

Temos assim que «analisar» a resposta ou respostas. Essa análise que nos vai dar a ideia, a imagem das propriedades do objecto, exige normalmente uma comparação de dados. E para isso é evidentemente útil ter um registo. Daí que muitas vezes a informação se guarde sob a forma gráfica, ou de um gráfico, ou de uma tabela.

Por economia de linguagem a esse gráfico, normalmente, chama-se espectro. Para quem o sabe interpretar, na realidade, esse gráfico dá a imagem do que são as propriedades do objecto. E então é na verdade o espectro. A variação da intensidade de uma emissão. Uma distribuição. O resultado de uma sondagem.

Não resisto a apontar um caso curioso e hoje em dia frequente. Julgo no entanto que para muitos a sua origem é desconhecida. Suponhamos que se quer uma

informação sobre um grupo de candidatos a um lugar. Fazem-se entrevistas, testes. E suponhamos que os registos dos resultados se apresentam do seguinte modo. Horizontalmente marcam-se, em várias linhas as quantidades possíveis. E à frente o seu grau, assinando com uma cruz a coluna correspondente: regular, medíocre, bom, óptimo. Unindo as várias cruces tem-se uma linha quebrada. Como se fosse uma cara num desenho cubista: um nariz, um queixo mais ou menos saliente, o encovado dos olhos. Às vezes não situados no lugar conveniente mas todos nós já vimos isso em pintura. De qualquer modo, usando um pouco de imaginação chamou-se a isso o perfil do candidato. E claro está, havia o «perfil ideal». Hoje em dia é frase corrente, objecto de pesquisa, e comunicação à imprensa. O que interessa para aqui, no entanto, é que como resultado da análise espectroscópica nós obtemos normalmente o registo das propriedades do objecto, registo a que chamamos o espectro.

E está fechado o ciclo — Perguntou-se, usando o processo mais adequado. Colocou-se, ou usou-se, o objecto na posição (ou disposição) adequada. E recebeu-se a informação pretendida. Com isto ficamos a saber qualquer coisa mais sobre o objecto.

Nas suas linhas gerais, é isto que a Espectroscopia nos dá. As propriedades, algumas, pelo menos, de um objecto. Objecto aqui tomado no seu sentido mais geral, como o provam a variedade dos exemplos escolhidos.

Mas será só isto? Já não era mau. Já que chegou para dizer que quase tudo é espectroscopia. Mas pelo menos suficiente para dizer uma frase que eu gosto muito de repetir: a fala é a Espectroscopia do espírito. Mas. Mas não é só isto, o que a Espectroscopia nos dá. Quando num processo temos vários elementos sucede geralmente que se conhecermos as regras do processo podemos ficar a saber qualquer coisa sobre um dos elementos desde o momento que conheçamos os outros. Veja-se por exemplo a relação simples

$$A + B + C = 1$$

em que A,B,C podem ter quaisquer valores numéricos. Como é óbvio, se eu souber os valores de duas destas grandezas posso calcular a terceira.

No conjunto global de uma observação espectroscópica há uma fonte (o tal perguntador), o objecto e o detector. Pois bem, se eu conhecer as propriedades do objecto e dominar as características do detector, posso estudar as propriedades da fonte. Ou dito de outro modo, posso estudar várias fontes, de modo a poder eventualmente escolher a fonte adequada para qualquer trabalho que surja. Se em contrapartida eu dominar as propriedades da fonte e do detector, posso estudar vários objectos. Este é na realidade o campo que até aqui tem sido o campo por excelência da espectroscopia, quando o objecto é o átomo ou a molécula. Finalmente se eu conhecer as propriedades da fonte e do objecto posso estudar o detector.

Mas não se esgotam aqui as possibilidades da Espectroscopia. E refiro-me aqui especialmente ao que é costume chamar métodos de análise. Já que estamos aqui a «conversar» em linhas gerais sobre o que é na generalidade a Espectroscopia cabe aqui referi-los.

Suponhamos que ao estudar, por operações espectroscópicas, vários objectos eu fico a conhecer as características de um conjunto de objectos. Então se eu tiver um objecto que é uma «mistura» desses objectos, eu posso fazer o que se chama uma operação de análise

Pois bem, a molécula vai, por assim dizer, administrar essa energia, como quem recebe uma mesada e a gasta em várias coisas. Repare-se contudo, na sutileza. A molécula recebe a energia na sua totalidade, e depois, como quem mete em vários envelopes, ou gavetas, ou níveis de energia, arruma-a.

Ora quando se verifica experimentalmente (e se confirma por cálculo de modelos, como é o caso) que o período das rotações moleculares é da ordem de 10^{-12} seg., que o período das vibrações dos átomos nas moléculas é de 10^{-14} seg. e que o período do movimento dos electrões é da ordem dos 10^{-13} seg. isso significa, por exemplo, que se podem dar cerca de 1000 vibrações considerando a molécula por assim dizer parada, do ponto de vista rotacional. Sendo possível «quantificar» o movimento de rotação, isto é, tratá-lo matematicamente por um modelo quântico e comprovar experimentalmente que esse modelo é adequado quando se estudam espectros de rotação puros, isto é onde só o nível de rotação é alterado. Torna-se então legítimo separar a energia de vibração da energia de rotação e dizer que «para um dado nível de vibração se podem considerar vários níveis de rotação». E do mesmo modo para os níveis electrónicos.

Assim, é válida a equação que envolve a constante de Planck h , desde que se admita que ela é simbólica. O valor ν_{el} é a frequência do fotão que seria absorvido numa transição electrónica pura; o valor ν_{vib} é a frequência do fotão que seria absorvido numa transição vibracional pura; o valor ν_{rot} é a frequência do fotão que seria absorvido num espectro de rotação puro.

E agora, só agora, é que numa aula ou discussão será legítimo começar a escrever algumas fórmulas. Rotor rígido, energia de rotação, constantes de rotação. Oscilador harmónico, correcção anarmónica, constantes de vibração. Transições electrónicas puras, estados $\pi, \pi^*, \sigma, \sigma^*, n$.

Depois começam as complicações. E não haveria melhor prova de que em tudo isto há aproximações. Os modelos actualmente usados são adequados, mas as correcções introduzidas mostram bem que a tal forma de decomposição de energia deixa muito a desejar.

Assim, nos espectros de rotação aparecem constantes de rotação que dependem do estado de vibração. Nos espectros de vibração são as correcções de distorção centrífuga (obviamente relacionadas com a rotação) que vão ter importância. E se numa primeira aproximação nós podemos considerar as vibrações separadamente, isso é graças à introdução das chamadas vibrações fundamentais que são em si um complexo de vibrações. Passe a ironia da frase, mas o que sucede é que para termos a regalia de esquecer a existência de «termos cruzados» envolvendo várias vibrações fundamentais, temos que considerar a molécula a vibrar como um todo.

Muito haveria para dizer. Mas o que pretendi nestas linhas foi dar a ideia (minha aliás) de respeito pelo rigor, pelo modelo. É preciso ir ao fundo da questão, em cada aula, em cada conversa. E termino esta secção com um exemplo que me parece sugestivo. O espectro de vibração da água. Há três vibrações fundamentais, que não são simples. E as vibrações que se observam são as vibrações fundamentais, os harmónicos e as suas combinações. Não há dúvida que a molécula «se arranja como pode para arrumar a energia que recebe» e que revela muita imaginação nisso. Está-se bem longe do modelo puro, que aliás continua bem presente na base de tudo o que se discute. Mas não é isso que se

passa connosco nesta nossa sociedade? Sondagens, estatísticas, tudo certo. Depois, correcções, acertos. Depois... o voto!

2. Espectros Atómicos

Num texto sobre problemas de espectroscopia nunca falta um capítulo sobre espectros atómicos. A propósito fala-se em átomos e há normalmente um parágrafo ou outro dedicado à evolução dos modelos atómicos. Rutherford, Bohr, Sommerfeld, a mecânica quântica depois. Contudo, nos últimos textos que eu li começo a vislumbrar uma certa confusão.

É costume dizer que traduzir é traír. E que quem conta um conto acrescenta um ponto. Conta-se a história de um rei que queria saber por que razão, apesar dos impostos lançados sobre os habitantes do reino, os cofres do Estado estavam vazios. E um conselheiro do rei pediu ao rei para se sujeitar a uma experiência. Mandou reunir o Conselho de Estado e pediu ao Rei para colocar os Conselheiros em fila, ficando o Rei numa ponta. Ao Conselheiro colocado no outro extremo deu uma mão-cheia de areia e disse aos Conselheiros que fossem passando a areia de mão em mão, até chegar ao Rei. É claro que quando chegou ao Rei já não havia senão alguns grãos de areia.

Tenho impressão que com os modelos atómicos quase se passa uma coisa semelhante. À força de contar a história ela foi perdendo o sentido. Estereotipou-se, solidificou, esquematizou-se.

E contudo ela é fundamental. Fundamental até porque ela condicionou fortemente a evolução do pensamento humano. A evolução dos modelos atómicos está na base do aparecimento da Mecânica Quântica. E a mecânica quântica introduziu uma tal revolução no pensamento humano que nada do que se passou depois a pode igualar.

Dentro do espírito com que são escritas estas linhas deixem-me pois expor algumas ideias sobre isto.

Estava-se em 1912. Em Manchester, para onde tinha ido parar, vindo da Austrália onde tinha trabalhado com substâncias radioactivas, estava Rutherford. Rutherford que já em Manchester tinha desenvolvido um modelo atómico. Como é sabido, Rutherford tinha bombardeado um alvo muito puro de ouro (escolhido pela simples razão de que é possível conseguir folhas muito finas) com partículas α e tinha verificado que algumas partículas α sofrem deflexões apreciáveis. Isso só poderá ser explicado se se admitir a existência de pequenos corpúsculos de electricidade positiva concentrados num espaço muito pequeno. Rutherford chamou a esses corpúsculos núcleos e idealizou um modelo atómico, que foi chamado planetário porque era semelhante ao sistema dos planetas no sistema solar. Sabia-se já nesse momento que nos átomos havia electrões, partículas de carga negativa. Pois bem, no entender de Rutherford os átomos eram constituídos por electrões movendo-se em torno do núcleo com um movimento regido pela lei de Coulomb de atracção de cargas eléctricas.

Seja-me permitido aqui um parêntesis mas que está dentro do espírito que estas linhas pretendem ter. Faz-me impressão, sempre me fez, a imprecisão linguística. A palavra tem um certo significado. E atrás da palavra vai sempre uma mensagem, não é o acordo ortográfico que interessa, o que interessa e interessa aqui fortemente. Lembro-me de que ouvi um jornalista dizer que «O Sr. Ministro veio aqui inaugurar algumas

carências...». Ora é costume, tristemente costume, dizer que no Átomo de Rutherford os electrões gravitam em torno dos núcleos. Errado, meus amigos. Isso significaria que os electrões se movem em torno dos núcleos sujeitos à lei da gravidade. Ora tenhamos um bocadinho de bom senso. Basta um pequeno cálculo, usar a massa do electrão e a massa do um núcleo para verificar que a força de gravidade que entre eles se exerce é completamente desprezável face à interacção devida à carga eléctrica. Portanto o electrão não gravita em torno do núcleo. Quando muito o electrão coulombiza em torno do núcleo. E mesmo isso, quanto a mim, terá que ser visto com cuidado.

Mas voltemos ao modelo atómico de Rutherford. Aí as coisas são diferentes. Sujeitos à lei de Coulomb, os electrões movem-se, como pequenos planetas, em torno de um sol, que é o núcleo. E as órbitas? São circulares, elípticas? Acontece que de acordo com uma lei de Maxwell, uma carga eléctrica com movimento acelerado radia energia. ora se o electrão radia energia, verdade do Sr. de La Palisse, perde energia. Mas se perde energia, o raio da sua órbita em torno do núcleo tem de diminuir. Então a órbita não pode ser circular. É uma espiral. E fatalmente o electrão cai, choca com o núcleo.

Em princípio isto pode não ser causa de alarme, mas se fizermos os cálculos a coisa complica-se pois pode verificar-se que o raio da trajectória do electrão atinge os 10^{-12} cm, considerados o diâmetro dos núcleos, em tempos da ordem dos nanosegundos e a conclusão é assustadora. Se os átomos são como Rutherford propôs, eles são instáveis. Duram 10^{-9} segundos! Ora toda a gente sabe que assim não é. Os átomos são estáveis. Além disso, de acordo com a teoria de Maxwell a radiação de energia por parte dos electrões deve ser a de energia com uma frequência igual à do seu movimento. Ora no seu movimento espiraloide a frequência varia continuamente. Então a radiação emitida pelos átomos deveria ser a de um espectro contínuo. Contudo os dados experimentais mostravam que um conjunto de átomos excitados radiava um espectro descontínuo, de riscas, que se sabe agrupar em séries perfeitamente definidas.

Em 1912 em Manchester, era esse o impasse. O átomo «planetário» de Rutherford explicava as experiências das partículas α . As equações de Klein e Nashima que estudavam a intensidade de um feixe de partículas, tinham sido verificadas. Fosse qual fosse a explicação o átomo de Rutherford não pode ser esquecido nem atirado para o cesto dos papéis.

Chega-se a 1913. Tinha vindo trabalhar com Rutherford um jovem físico dinamarquês, Niels Bohr. Baseado nos trabalhos de Planck sobre a teoria do corpo negro, e que já eram conhecidos desde 1900, e sobre os estudos de Einstein (1908) do efeito fotoeléctrico, Bohr «resolve» que o melhor processo de assegurar que o átomo de Rutherford seja estável é postular que é estável. E vai mais longe. Afirma que as órbitas em que o movimento angular é igual a um múltiplo da constante de Planck dividido por 2π não perdem energia. Assim as órbitas em que

$$mvI = n \frac{h}{2\pi}$$

não radiavam energia, eram estáveis. Mas se o electrão passasse de uma órbita caracterizada por um dado n para outro de raio menor com um n menor, radiava energia com uma emissão de um fotão (hipótese de

Einstein) de energia $h\nu$, de acordo com as ideias de Planck (o tal postulado era revolucionário, é certo, mas de acordo com as ideias revolucionárias já em vigor na época). O espanto da história é que nesta base se explicavam as conhecidas leis empíricas dos espectros dos átomos, de um modo tão perfeito que o problema podia considerar-se resolvido.

Temos aqui um belo exemplo do que pode ser aqui a interacção entre o teórico e o experimental. É para mim evidente que existe a chamada verdade dos factos. O universo físico existe e é de determinada maneira. Ao longo dos tempos os homens foram tirando o véu que tapava os conhecimentos (chama-se a isso descobrir). E é curioso verificar a intuição de um jovem, Bohr, resolvendo, graças à sua intuição, o problema que preocupava os grandes mestres.

Controvérsia aqui, controvérsia acolá, o modelo de Bohr soube vencer.

E quando parecia sossobrar recebeu novo alento devido à contribuição de De Broglie. Discutia-se o dualismo onda-corpúsculo. Sabia-se da existência de ondas electromagnéticas mas que os fotões se comportavam como corpúsculos. Os electrões comportavam-se como corpúsculos. porque não, por uma questão de harmonia, admitir que em determinadas circunstâncias eles se comportavam numa experiência, como uma onda? Se assim fosse o seu comprimento de onda deveria ser dado tal como para os fotões, pela razão entre a constante de Planck e quantidade de movimento

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Pois bem, o lógico seria admitir agora que para que as órbitas admitidas por Bohr fossem «estacionárias», não radiassem energia, era necessário admitir, dizia eu, que elas se «fechassem» isto é, que o comprimento de onde fosse um sumúltiplo do perímetro

$$2\pi r = n\lambda$$

Então

$$2\pi r = n \frac{h}{mv}$$

e assim

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

Encontramos o postulado de Bohr! Mais do que isso, justificamos o postulado. Mais ainda, levanta-se novos pontos do véu. O mundo dos átomos pode ser descrito com base numa teoria ondulatória. Estava aberta a porta da Mecânica Quântica.

3. Spin e efeitos magnéticos

Interacção entre a teoria e a experiência. Encontro entre cientistas, técnicos e experimentalistas, numa sã conferência que se perdeu mas que é necessário reencontrar, provocam uma funda reformulação de conhecimentos. Ramos que pareciam divergentes, como a Mecânica das matrizes e a Mecânica Ondulatória são unificados pelos trabalhos desse génio que foi Dirac. Dirac a quem se deve, entre outras contribuições, o estudo relativístico das equações de onda, através das quais se demonstra a existência de um fenómeno não existente, melhor, não patente na mecânica clássica — o movimento intrínseco das partículas, que tinha sido introduzido como hipótese por Pauli — o spin.

Eis aqui um outro assunto que merece reflexão. O spin. Estamos no fundo de um saco. Fenómeno radiativo só determinável no âmbito de teorias complicadas com velocidades electrónicas próximas das da luz. Hipótese de spin, essencialmente introduzida para explicar o chamado efeito de Zeeman anómalo.

O efeito de Zeeman foi descoberto por Zeeman e diz respeito ao desdobramento de riscas de um espectro quando sobre a fonte que emite o espectro se faz actuar um campo magnético. Pois bem, o que a teoria previa era que uma dada risca se desdobrasse em três. Isso verifica-se, é certo, mas em poucos casos. O que acontecia era verificar-se o aparecimento de um conjunto de riscas, com número imprevisível. Chamou-se a esse efeito o efeito de Zeeman anómalo. Mas o que é curioso é que no fundo o efeito de Zeeman anómalo é que é perfeitamente normal e o efeito de Zeeman normal é que é fora da normalidade.

Os raciocínios que estão na base do efeito de Zeeman são os seguintes. O momento angular de rotação pressupõe um movimento do electrão. Assim sendo é a criação dum campo magnético, e a possibilidade de definição dum momento magnético. Nessa altura a energia varia de acordo com as leis de quantificação habituais, haverá tantos níveis de energia diferentes quantas forem as possibilidades de projecção do vector momento angular relativamente a um eixo de referência. Esse número de posições implica a possibilidade de um «movimento» do momento angular numa superfície cónica.

É este outro ponto que merece uma reflexão. A cada posição do momento angular corresponde um plano perpendicular onde se situa a órbita do electrão. O que é diferente de caso para caso é a posição do plano. O resto vem por acréscimo. Mas o que acontece é que a descrição do fenómeno pode ser feita «segundo» o tal movimento de percurso do movimento angular.

E tantas quantas forem as possibilidades desse movimento sobre a superfície cónica tantas serão as projecções possíveis do momento angular. Mostra a Mecânica Quântica que se for l o valor do número quântico do momento angular que quantifica o módulo do momento angular de acordo com a expressão habitual

$$|l| = \sqrt{L(L+1)} \frac{h}{2\pi}$$

o número de projecções possíveis de l sobre o eixo dos zz é $2l+1$ e que, se se fizer coincidir o campo magnético exterior com a direcção do eixo dos zz o acréscimo de energia do electrão na órbita é

$$\Delta E = B_l H M_l$$

em que

$$B_l = \frac{eh}{4\pi m_e c}$$

é o magnetão de Bohr, m_e é a massa do electrão e M_l o número quântico magnético orbital que pode tomar os valores

$$M_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

Com estas simples fórmulas é possível explicar o tal efeito de Zeeman normal. E surge então o spin. É como se fosse um novo momento angular que vai poder combinar-se com o momento angular orbital, criando um momento angular total cujo módulo e projecções possíveis são quantificadas de modo semelhante ao indicado acima. Um pormenor curioso é no entanto que uma vez que o spin não é propriamente um vector

é de sua própria natureza que o momento magnético tenha associado um factor (o factor de Landé), de valor aproximadamente 2. Daí, como vemos, levar uma certa complexidade de análise mas daí também a possibilidade de explicar o tal efeito de Zeeman anómalo. Mas o efeito de Zeeman exige a transição entre níveis electrónicos. E que tal a exploração espectroscópica entre os níveis de spin puros? Ao fazê-lo teórica e experimentalmente surge uma das maravilhas deste século.

Espero que compreendam o que eu quero dizer já que me leram até aqui. Tenho procurado dar algumas, se bem que dispersas, ideias sobre Espectroscopia. O estudo de transições entre estados de spin puros trouxe uma nova revolução ao conhecimento de átomos e moléculas.

Trata-se de ir ao mais fundo dos níveis. Quase como se tirasse um pozinho com um sopro. Se se trata de um electrão não ligado a outro por forças de spin (um electrão desemparelhado) temos as técnicas de EPR, aplicáveis a substâncias paramagnéticas, radicais, estados tripletos.

Mas a grande atenção vai para o NMR em que o spin envolvido é o do núcleo. Então no magnetão de Bohr, a massa que aparece é a do núcleo e não a do electrão. Ora os núcleos podem ter spins de vários valores, uma vez que ele é o resultado dos spins dos nucleões que os compõem. Acontece que para o carbono é zero, para o hidrogénio é 1. Então em primeira análise o NMR para um Químico Orgânico será um meio de contagem de átomos de hidrogénio. Contudo isso não é assim, porque cada átomo de hidrogénio vai sofrer o efeito do «ambiente» dos spins dos átomos vizinhos. E vê-se assim o poder do novo instrumento de análise. De há largos anos para cá as técnicas de NMR são de utilização imprescindível para a Química Orgânica.

Nesta soma de escritos sobre espectroscopia procuramos trazer aqui qualquer coisa hoje sobre os aspectos mais clássicos. Mais ideias que factos. No próximo tentaremos alargar o leque destes aspectos.

Parte III

A. Espectroscopia e Ciências Biológicas

Esta é a terceira parte de um conjunto de textos sobre Espectroscopia que me propus escrever a pedido do actual Director do Boletim, e especialmente dirigido aos Professores do Ensino Secundário, dando-lhes conta de algumas das minhas ideias sobre a Espectroscopia. Textos que queria que iniciassem com diálogo. Tenho esperança que alguém me escreva ou procure um outro contacto. A estes três textos outros três e um final, à guisa de conclusão, se seguirão, se esse diálogo tiver lugar ou surgir a evidência a justificá-lo.

Escrevi estes textos com prazer mas não para ter prazer. Não tenho a mania da «missão a cumprir» embora, ao longo da vida tenha procurado vislumbrar o quinhão que me cabe na marcha da Evolução. Mas não quero escrever para me desobrigar ou só para tirar prazer nisso. Há muito boa gente que gosta de ensinar. Ótimo. Mas muitos há que gostam de ensinar determinadas coisas, e só essas. Já imaginaram um médico que, fosse qual fosse a doença do paciente, lhe fazia uma operação ao apêndice só porque gostava?

Nesta terceira parte, e última, desta série, gostaria, pois me parece um digno fecho, de escrever qualquer coisa menos clássica. De lançar algumas dúvidas, etc. E começa com uma reflexão.

Na segunda parte destes escritos foi dito que uma das técnicas mais apuradas da espectroscopia era a do NMR. Ir-se tocar no mais íntimo dos movimentos — o movimento intrínseco próprio, de retoque relativista que é o spin do núcleo. Como habitualmente o que se detecta é uma diferença de energias. Mas, tal como foi referido, no NMR o que se detecta é o diferente efeito que grupos funcionais diferentes têm sobre um átomo de hidrogénio. E isso inicialmente devido ao spin dos átomos vizinhos, ao efeito magnético desses átomos.

Técnica requintada. Expondo alta estabilidade, campos intensos. Análise matemática sofisticada, estudos requintados. Para além de aplicações que já prefiguravam os campos, onde hoje actuam, espectroscopistas do NMR desenvolveram trabalhos notáveis no domínio do estudo de reacção em Química Orgânica, estudo de grupos, isomerizações, configuração espacial. Mas uma nova ideia surgiu um dia. Se os grupos funcionais desempenharem um tal papel no «sinal» de NMR que uma molécula deixava adivinhar, qual seria o efeito de sujeitar uma macromolécula, uma dessas complexas entidades do interesse dos bioquímicos e biofísicos, a técnicas de NMR? O resultado foi reconfortante. Há um sinal *sui generis*, denunciador e elucidador de estruturas.

De então para cá a Bioquímica e a Biofísica não se separaram mais das técnicas de NMR, tal como tinha sucedido com a Química Orgânica.

Faltava dar um novo passo. Aplicar o NMR aos próprios seres vivos.

Eram conhecidas já aplicações de Espectroscopia aos problemas de seres vivos, no campo da Medicina. Como é óbvio um dos campos mais importantes era o das Análises Clínicas. Cada vez mais utilizadas em diagnóstico, determinação de sais, identificação de compostos e sua análise quantitativa tudo isso segue as regras da Espectroscopia Clínica.

Era também conhecida de longo tempo a técnica de raios X. Essencialmente aplicada primeiro ao tecido ósseo, viu alargado o seu campo graças a métodos *sui generis*. Se se pode seguir a imagem de objectos opacos (ou mais opacos) aos raios X, então porque não «encher» os órgãos (estômago, intestino, vasos sanguíneos) com substâncias opacas e sujeitá-las depois aos raios X? E assim foram detectadas anomalias nesses órgãos, como é do conhecimento corrente.

Contudo não se pode abusar dos raios X. Em Medicina pré-natal poderiam ser (e são) úteis. O uso frequente pode provocar o cancro. Havia que procurar novas técnicas. Elas surgiram com o NMR. É para mim uma das maravilhas de aplicação da Espectroscopia a aplicação do NMR. Uma técnica que parecia ser do domínio exclusivo dos laboratórios que se dedicaram a estudos refinados de estrutura molecular veio

afinal a ser um poderoso instrumento de trabalho, no domínio dos estudos sobre os seres vivos. Análise de zonas anómalas, em especial no domínio da oncologia, mas não só, preparação de intervenções cirúrgicas, estudos no domínio cerebral.

Em minha opinião foi o sucesso do NMR em Medicina que abriu caminho a novas técnicas. Baseado em efeito de som, como a Ecografia. Em efeitos de calor, em efeitos de micro-ondas.

Hoje em dia o técnico espectroscopista tem o seu lugar imprescindível junto do médico. E não me parece possível a organização de um bom Hospital sem um Departamento de Espectroscopia.

2. Espectroscopia e Ciências Sociais

Mas não é só no domínio das ciências biológicas que a Espectroscopia se tem vindo a desenvolver nas últimas décadas. Em minha opinião este assunto não tem sido encarado devidamente. Refiro-me concretamente às Ciências Sociais. Observam-se técnicas de recursos, soluções em cima do joelho, precárias de emergências. Deixem-me expôr algumas ideias. Técnicas de mercado por exemplo. As análises são diferentes, as estruturas mal elaboradas, incompletas e portanto de errada interpretação. Técnicas de economia. O problema é semelhante embora cada vez mais se sinta a necessidade de intervenientes nas coisas de economia terem a ajuda de métodos matemáticos.

E liga-se aqui o problema da informática. A humanidade assistiu, nos últimos anos, ao que já se chama a revolução informática. Basta ler esse livro famoso que é a Turing Machine. Quem já alguma vez teve, por gosto ou necessidade, de dialogar com um computador, deixou de ser o mesmo. Eu já li um livro dedicado a um computador.

É claro que do ponto de vista de utilização dos meios de informática ressaltam de imediato duas vantagens que só por si justificam que se fale de revolução. A compilação e a comparação de dados. Pode guardar-se em computador um enorme conjunto de dados, ocupando espaços reduzidíssimos se fôssemos compará-los a folhas de cadernos. Mas para além disso o acesso a esses dados é fácil (muito mais do que se fôssemos buscar um «dossier» a uma gaveta). Mas mais ainda o computador compara e analisa em conjunto esses dados com uma facilidade e rapidez que a sua substituição nesse trabalho só poderá ser feita com pessoal numeroso. Se juntarmos a isto a capacidade que o computador tem de efectuar cálculos também aqui com uma velocidade não conseguida pelo operador poderemos ver o que o computador traz de novo.

Mas nós estamos a considerar problemas de Espectroscopia e não de informática. Ainda por cima num texto *sui generis*, misto de divulgação e reflexão. Muito haverá por dizer sobre este assunto mas não cabe aqui. Onde é que cabe então o Espectroscopista? Quanto a mim, em dois pontos. Um é na pergunta feita ao nível do programa. Na elaboração do programa. E outro, que é que se uma nova técnica espectroscópica, na análise dos dados compilados e fornecidos pelo computador. Pode entrar aí toda a capacidade inventiva de um espectroscopista. Pode aí toda a calma e ponderação de um bom técnico ter a sua aplicação.

Li há tempos numa revista de Espectroscopia que se o espectroscopista se não sabe reconverter, ele terá de seguir facilmente «o caminho dos dinossauros», isto é,

desaparecer pura e simplesmente. Quanto a mim isto é um dos caminhos possíveis da reconversão. De um outro falaremos na secção seguinte.

Esta nova faceta (será mesmo nova ou um novo grau?) do espectroscopista tem uma incidência directa em Ciências Sociais. E estive aqui a pensar em Ciências de Educação e em Meios de Comunicação.

Não cabe aqui, por manifesta falta de espaço, desenvolver estes assuntos. Mas qualquer deles acaba por ter uma secção que é o estudo do modo como se devem difundir as ideias. Ora é sabido como a geração jovem actua e é receptiva à ideia transmitida por imagem. Houve tempo em que a mensagem verbal era a única possível. Mas houve tempos em que a mensagem era o ensaio, o livro, a peça de teatro. Hoje em dia é a imagem que domina. O cinema já era um pronúncio. Mas a televisão veio superar e ultrapassá-lo, quanto a mim. E a imagem inundou tudo. O vídeo começa a querer ser peça caseira. O Conhecimento é reduzido a tabelas, gráficos, listas, linhas.

Que campo largo se abre aos espectroscopista, habituado a lidar com espectros. Abriu-se a porta do espectro puro. Que se pode dizer, com uma certa ironia, que se está à beira da espectroscopia pura. A prová-lo está em que ela, na sua forma de gráficos, começa a ser uma forma de Arte.

Ciências de Educação. Educar é conduzir. Quanto a mim é ajudar a formar um espírito capaz de fazer progredir a Evolução. Li há pouco tempo que educar é «dar uma Mensagem que não sofra constestação». Estou em completo desacordo. Quanto a mim é necessário dar ao educando os meios necessários para ele se saber comportar sozinho neste emaranhado complexo que é a Vida. Saber ensinar, isto é mostrar o sinal da Verdade mas esperar que o aluno o recolha. O Mestre deve orientar, mostrar o caminho (importante é mostrar que há um caminho). E sobretudo ensinar a caminhar sozinho.

Ciências de Comunicação. Muito se poderia escrever sobre isto. As técnicas. os objectivos. os desvios. O poder da imagem, mais uma vez.

Abrem-se hoje em dia campos nunca imaginados. Nas cassetes de vídeo constroem-se maravilhas. Os resultados artísticos são abundantes.

3. A Espectroscopia e as Ciências Físicas e Químicas

Guardei para o fim algumas notas sobre o domínio da Espectroscopia mais clássica. Num curso básico sobre espectroscopia, tal como referi na segunda parte destes textos, é ponto obrigatório a espectroscopia molecular, electrónica, vibracional, de rotação; a espectroscopia atómica; a espectroscopia de campos magnéticos começa a ser constante, também. Depois vêm as chamadas outras formas de espectroscopia, desde as mais «antigas» como os raios X, espectroscopia de fotoelectrões, as mais «modernas» como a de Mossbauer.

A espectroscopia de massa também tem o seu lugar. Pode discutir-se se cabe dentro da definição de espectroscopia. Dentro do espírito com que estas linhas foram apresentadas é evidente que cabe. O que interessa

é elaborar um espectro, uma imagem. Ora qual é o «original» da imagem que é o espectro de massa?

Recorde-se que num espectro de massa se observa um conjunto de riscas ou bandas, em que cada pico corresponde a um valor da relação entre a carga e a massa de um ião. Ião esse que é produto da excitação de uma molécula com um feixe electrónico, molécula que se fragmenta em vários iões. É como que uma explosão. E o espectro de massa é a imagem dessa explosão, de uma espécie de fogo de artifício. Forma de espectroscopia, pois, o espectro de massa.

E deixei para o fim uma forma de espectroscopia que muitas vezes é relatada em associação com a espectroscopia de absorção electrónica. Trata-se da fluorescência e a sua forma associada fosforescência.

Na fluorescência é a luz que é emitida pela própria molécula (ou átomo) excitado que é detectada e analisada. Já não é como um absorção em que o feixe emitido por uma parte é modificado na sua composição. Quando interactua com o objecto e daí termos informações sobre as propriedades do objecto, mais concretamente sobre os níveis de energias moleculares. Agora é a desexcitação que por ser radiativa (não confundam com radioactiva) permite o estudo de estruturas. Normalmente é o estado electrónico singuleto excitado de mais baixa energia que é responsável pela emissão da luz, nas moléculas orgânicas. Mas outros níveis podiam intervir, em complexos de transferência de carga em exciplexos, em excímeros. Muito haveria que contar aqui.

Gostaria de realçar a importância que tem hoje a fluorescência no domínio de identificação de espécies químicas. Daí a tão larga utilização no estudo de reacções, onde se incluem as que se dão com níveis excitados.

Atenda-se sobretudo a que um grande número de moléculas de interesse biológico são fluorescentes. Note-se que um grande número de processos de transferência de energia entre moléculas podem ser seguidas por técnicas de fluorescência e que um número cada vez maior de reacções que se dão ao nível da célula podem ser estudadas por técnicas de fluorescência e fosforescência.

Procurei, ao longo destes três textos, deixar algumas ideias, alguns factos, alguns comentários. Repito que gostaria de sentir que estes textos são uma espécie de semente, de início de diálogo. Cabe agora aos leitores (espero que os tenha havido), a resposta.

Se consegui inquietar alguns espíritos, tanto melhor. O ensinar tem que ser, deve ser, um prazer. Foi com prazer que escrevi estas linhas.

Tive há pouco tempo contacto com um investigador que me contou que numa entrevista lhe perguntaram por que razão ele fazia investigação. Ele respondeu que o fazia «pour s'amuser». Pois foi chamado à pedra tempos depois. Disseram-lhe que a investigação devia ser levada a sério, muito a sério.

Já será uma aquisição do tom com que eu escrevi estes textos que o leitor saiba sem a menor dúvida de que lado eu me situo quanto a esse «muito a sério» na investigação.



SOFOEQUIP

PRODUTOS E EQUIPAMENTOS PARA A INDÚSTRIA E LABORATÓRIOS LDA

DINAMISMO - QUALIDADE

SERVIÇO

ESCOLHA - EFICIÊNCIA

*PEÇA-NOS A LISTA DAS NOSSAS REPRESENTADAS
ALGUMA LHE INTERESSARÁ!*

Estamos à distância do seu telefone...

QUINTA DA PIEDADE, LOTE 12 - 1.º
TEL. (01) 259 44 62 - 259 46 15

2625 PÓVOA ST.ª IRIA
TELEX 43926 DISO-P

Abordagens científicas do ensino da Ciência *

Frederick Reif ^a

Compreender o modo de pensar dos estudantes e cientistas é a chave para criar métodos de ensino mais eficazes, e é em si um desafio intelectual.

O ensino tradicional das ciências é grandemente fruto da intuição e por isso é, em muitos aspectos, pouco científico. Enquanto nós abordamos os problemas da ciência e da engenharia pelo uso sistemático de princípios fundamentais, aos problemas do ensino da ciência não dedicamos mais do que uma atenção superficial, sem qualquer tipo de reflexão aprofundada. E se em física nos esforçamos por tentar compreender os mecanismos subjacentes a um dado fenómeno, em educação satisfaz-nos plenamente a ideia de os cientistas e estudantes serem «caixas pretas» cujo funcionamento interno não precisa de ser conhecido, não obstante a importância deste conhecimento.

O ensino tradicional é muito menos eficaz do que poderíamos pensar. Por exemplo, vários estudos recentes [1] mostram que muitos estudantes, depois de frequentarem cadeiras de física onde aparentemente tiveram bom aproveitamento, continuam a fazer confusões graves e a voltar a noções pré-científicas ao defrontarem problemas reais, sendo com frequência incapazes de aplicar os conhecimentos adquiridos na resolução de questões simples.

Pelo contrário, numa abordagem mais científica haverá a preocupação de compreender os processos de assimilação de conhecimento que levam a um domínio efectivo de um dado campo. Uma vez isto feito, bastará aplicar estes dados no planeamento de um ensino realmente efectivo.

Há três vantagens potenciais numa tal abordagem:

- (i) Conduz a uma maior compreensão dos mecanismos do pensamento em situações complexas. Se suficientemente desenvolvida, pode ser importante em áreas como a psicologia cognitiva e a inteligência artificial.
- (ii) Conduz a métodos de ensino da ciência melhor fundamentados e simultaneamente mais eficazes.
- (iii) Conduz pelo menos a uma ideia generalizada da importância do assunto, diminuindo a probabilidade de os professores prosseguirem práticas ineficazes ou mesmo contraproducentes.

Neste artigo descrevo resumidamente algumas experiências recentes no sentido de uma abordagem sistemática do ensino da ciência, e em especial da Física.

Aspectos centrais

Podemos encarar o processo de aprendizagem como uma transformação em que o estudante S passa de um estado inicial S_i para um estado final S_f , de maior

capacidade de desempenho intelectual. O estudo sistemático desta transformação implica dar resposta a quatro questões:

- (i) Que sabe e como pensa o estudante no estado inicial S_i ?
- (ii) Que deve saber e como deve pensar o estudante para atingir o estado final S_f ?
- (iii) Qual o processo de aprendizagem (ensino) adequado à transformação $S_i \rightarrow S_f$?
- (iv) Quais as técnicas e métodos de aprendizagem (ensino) para a execução prática do processo de transformação?

Trata-se de uma situação análoga à existente em Medicina, em que o objectivo é a passagem de um estado inicial malsão para um estado final saudável. Nesse caso os aspectos a estudar são:

- (i) Mecanismo da doença
- (ii) Funcionamento do corpo saudável
- (iii) Terapia que induz a evolução para o estado saudável
- (iv) Estruturas e práticas para a aplicação de cuidados médicos.

Todos estes aspectos são complexos e constituem por isso desafios intelectuais. Também a resposta às questões equivalentes em ensino da ciência não é menos estimulante do ponto de vista intelectual.



Figura 1

Ensino da física baseado na compreensão dos mecanismos do pensamento científico. O estudante da fotografia está a utilizar um programa didáctico num computador que incorpora inteligência artificial e bons gráficos. Estes computadores têm sido usados em investigação dos processos de raciocínio, e na concepção e aplicação de métodos de ensino tendo em conta essa mesma investigação

* Traduzido de Physics Today (Novembro de 1986, p. 48) por Mário N. Berberan e Santos, com autorização do American Institute of Physics e do autor.

^a Department of Physics and School of Education, University of California, Berkeley, CA 94720, EUA.

Mesmo o estudante no estado inicial S_i é surpreendentemente complexo. Com efeito, ele não tem nesse estado uma mente vazia a ser preenchida, mas sim uma estrutura de conhecimento pré-existente a alterar. Vários estudos recentes em física [2] e noutras áreas [3] mostram que os estudantes, independentemente da idade, possuem conceitos e teorias rudimentares sobre o mundo. Numa perspectiva científica, tais ideias são por vezes incorrectas [4], e as teorias incompletas e superficiais. Acresce a grande dificuldade em substituí-las por outras, o que constitui um obstáculo importante à aprendizagem.

A constatação de que ensinar significa modificar estruturas pré-existentes tem importantes implicações:

— Não basta que os currícula científicos indiquem as matérias a ser ensinadas. As noções prévias dos estudantes devem ser identificadas e tidas explicitamente em conta.

— A tarefa de reestruturar estruturas pré-existentes é mais delicada do que a de transmitir novos conhecimentos, e portanto implica o recurso a técnicas de ensino mais sofisticadas (figura 1).

O ponto fulcral de um ensino sistemático é a compreensão dos processos de conhecimento e de raciocínio pelos quais o estudante pode atingir determinadas capacidades. O estado final adequado é aquele em que o estudante não se limita a recordar, mas em que é capaz de resolver problemas e de raciocinar sobre situações novas.

Para definir perfeitamente um tal estado, é preciso saber responder às seguintes perguntas:

— Que conhecimentos básicos devem ser dados ao estudante para que este possa interpretar os conceitos científicos?

— Como deve o estudante organizar o conhecimento científico de modo a utilizá-lo com eficácia na resolução de problemas?

— Como deve o estudante reformular os problemas de modo a tornar mais fácil a sua resolução?

— Quais os critérios a seguir pelo estudante na tomada de decisões para atingir a solução?

Os cientistas são incapazes de responder correctamente a estas perguntas porque grande parte do seu conhecimento é «intuitivo», isto é, inconsciente (do mesmo modo que muitos dos falantes de uma língua são incapazes de indicar as regras gramáticas que utilizam com perfeição).

O carácter intuitivo do *modus cogitandi* do especialista torna-se evidente quando se tenta — caso dos investi-

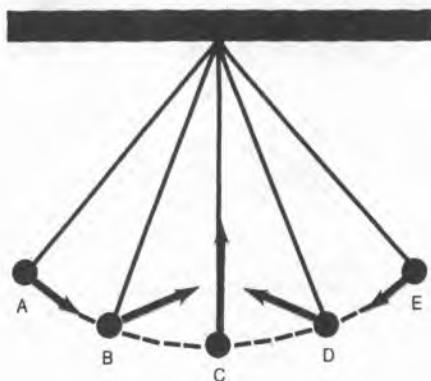


Figura 2

Aceleração de um pêndulo em vários pontos. Muitos estudantes afirmam que a aceleração é nula em A e C, ou que é tangente à trajetória em B e D. Na verdade a aceleração não é nula em nenhum ponto e tem as direcções e sentidos indicados

gadores em inteligência artificial — incorporá-lo em programas de computador destinados a imitar a forma humana de resolver certos problemas.

Devido ao facto de grande parte do conhecimento ser inconsciente, os professores têm muitas vezes tendência a subestimar a complexidade do que ensinam. Os especialistas recorrem com tal frequência a certos «truques» que os dão por sabidos, não os ensinando explicitamente. Na realidade, muitas das dificuldades sentidas pelos estudantes são precisamente devidas a lacunas deste tipo. A mera apresentação do conhecimento intuitivo do especialista não é suficiente para o ensino efectivo. Com efeito, os estudantes têm quase sempre de aprender a realizar as tarefas, algo que se torna automático ao fim de anos de experiência.

Nas páginas que se seguem, apresento os vários aspectos centrais em ligação com casos concretos, descrevendo tentativas de identificar e de ensinar explicitamente os vários procedimentos sistemáticos de abordagem dos problemas científicos.

Interpretação dos conceitos científicos

Numerosos estudos [1,2] mostram que o estudante tem grande dificuldade em interpretar os conceitos científicos. Para estudar o assunto em pormenor, fizemos recentemente [6] um inquérito a alunos universitários que durante dois meses haviam estudado e usado o conceito de aceleração numa cadeira de Mecânica Geral. O tipo de perguntas feito é ilustrado na figura 2. Para cada posição do pêndulo limitávamo-nos a perguntar se a aceleração era nula e, em caso negativo, qual a sua direcção e sentido. Mais de metade das respostas estavam erradas.

Aos estudantes foi pedido que expusessem em voz alta o seu raciocínio, à medida que pensavam nos problemas. Isto permitiu-nos analisar posteriormente em pormenor as respostas registadas num gravador. Este estudo, tal como outros, revela a incoerência do conhecimento conceptual do estudante. Por exemplo, um dado conceito científico é normalmente interpretado recorrendo a várias noções fragmentárias relacionadas com este, muitas das quais são incorrectas. Raramente há a tentativa de usar a sua definição e, quando tal sucede, a interpretação dada à definição é muitas vezes indevida. É também rara uma tentativa de conciliar as várias incoerências encontradas.

As noções de base necessárias à compreensão de um dado conceito científico [7] são realmente complexas. Por exemplo, para haver a certeza de se estar a usar correctamente um dado conceito, é necessário possuir conhecimentos elementares sobre o seu significado e simultaneamente possuir maneira de o identificar ou construir. Relativamente ao conceito de aceleração, por exemplo, os conhecimentos elementares incluem uma definição tal como $\vec{a} = d\vec{v}/dt$ e um processo da construção como o indicado na figura 3. Para assegurar uma interpretação, rápida e sem grande esforço, é também necessário estar de posse de um conjunto de casos particulares — aceleração no movimento circular, por exemplo.

Assim, uma interpretação adequada e eficaz dos conceitos implica o recurso conjunto a estes dois tipos de conhecimento, bem como a outros não mencionados aqui.

Este modelo da interpretação correcta de conceitos afasta-se bastante do habitual em estudantes recém-entrados na Universidade, mas é próximo do dos cientistas. O especialista ao ser defrontado com o problema

da figura 2, por exemplo, determina a aceleração em C recorrendo a *conhecimentos específicos* sobre movimento circular uniforme, mas já determina a aceleração em A pelo *processo geral* de comparação de velocidades em dois pontos. Contudo, mesmo alguns professores de Física têm dificuldade em responder às questões aparentemente simples da figura 2.

Para investigar as implicações educacionais do modelo de interpretação correcta de conceitos, estes foi utilizado com estudantes no caso específico da aceleração. Depois de terem praticado a sua aplicação em exercícios individuais, entre os quais a detecção e correcção de erros cometidos previamente pelos próprios e de «erros» pretensamente cometidos por outros, instrução esta que teve uma duração total de cerca de meia-hora, os estudantes respondiam correctamente a 29 de 30 questões sobre aceleração [6], já não apresentavam as confusões iniciais, eram capazes de explicar as dificuldades sentidas anteriormente, e estavam em condições de encontrar e corrigir erros alheios.

O estudo realizado sofreu de algumas limitações, especialmente por não ter investigado a aprendizagem a prazo. No entanto, mostra a importância de ensinar explicitamente os processos de interpretação dos conceitos. Um tal ensino explícito é, na prática, muito raro, pois os conceitos são quase sempre introduzidos através de meras definições ou por analogias vagas.

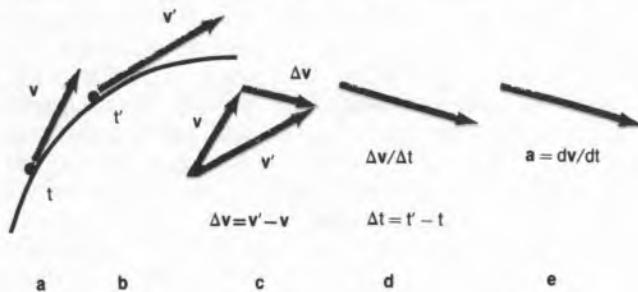


Figura 3.

Processo de definir a aceleração de uma partícula. a: velocidade \vec{v} no instante t . b: velocidade \vec{v}' no instante ligeiramente posterior t' . c: obtenção da diferença vectorial $\Delta\vec{v}$. d: obtenção do quociente $\Delta\vec{v}/\Delta t$. e: obtenção do limite deste quociente quando $t' \rightarrow t$.

Organização do conhecimento

Uma utilização eficaz do conhecimento passa necessariamente por uma boa organização deste. As várias pastas de um arquivo podem conter informação valiosíssima mas esta será quase inútil a menos que haja uma ordenação das mesmas.

Questão fulcral: como organizar o conhecimento de modo a maximizar as capacidades de recordação, resolução de problemas e aprendizagem?

Para estudar o efeito de uma diferente organização dos mesmos conhecimentos científicos, realizámos [8] uma experiência com dois grupos de alunos. Ambos deveriam recordar uma mesma argumentação científica (a resolução de um problema) mas apresentada de maneira diferente aos dois grupos. A um, a argumentação foi apresentada de uma forma «linear» numa sequência detalhada em vários passos levando das premissas à conclusão; ao outro, a argumentação foi apresentada de uma forma «hierárquica»: uma sequência dos passos mais importantes, cada um dos quais por sua vez organizado em sequências mais pormenorizadas. Como se vê pela figura 4, o grupo da forma hierarquizada de

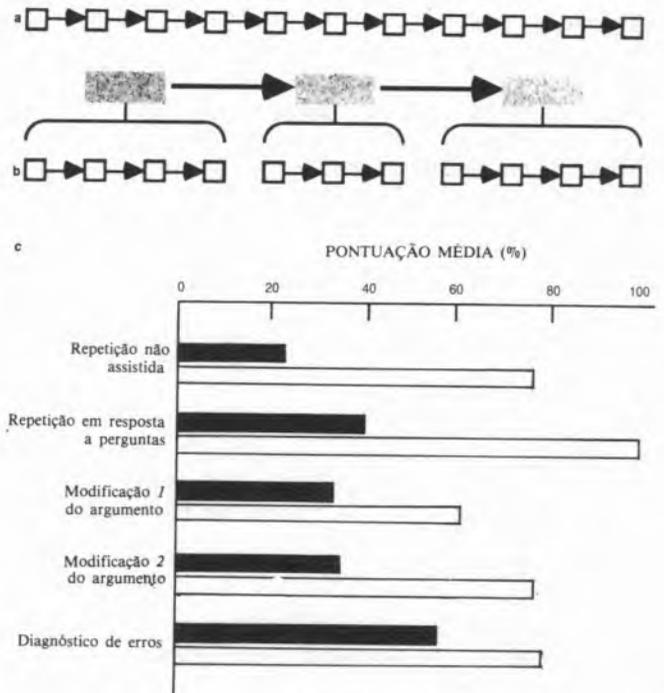


Figura 4

Efeito do modo de organizar o conhecimento sobre o desempenho de uma certa tarefa a: Representação esquemática da organização linear b: Organização hierárquica do mesmo argumento c: Aproveitamento dos estudantes a que foi ministrada a organização linear (negro) e a organização hierárquica (cizento)

resolução foi o mais capaz na memorização, compreensão do efeito de erros e na modificação da argumentação ao alterarem-se as premissas. Estes resultados eram previsíveis, pois uma estruturação hierarquizada permite simplificar a procura interna de informação e «perceber nas árvores uma floresta» (*to see the forest amidst the trees*).

As vantagens de uma organização hierárquica do conhecimento são ainda mais evidentes em situação de maior complexidade. Por exemplo, os programas de computador muito extensos têm uma estruturação hierárquica [9] para facilitar a sua escrita, compreensão e eventuais modificações. Campos inteiros do conhecimento. Como a Mecânica, podem também, com vantagem, ser organizados hierarquicamente [10].

Estes estudos cognitivos sugerem que devemos prestar pelo menos tanta atenção à organização do que se ensina como ao que se ensina — o que quase nunca se faz. Quer a solução de problemas, quer o raciocínio científico, são quase sempre apresentados na forma linear e não na forma hierárquica. Embora a lógica daquela seja inatacável, os estudantes não ficam nas melhores condições de utilizar a informação recebida, não lhes sendo ao mesmo tempo inculcados modelos de organização eficaz do conhecimento.

Resolução de problemas

Dada a importância da resolução de problemas na realização de induções científicas, esta é normalmente aplicada e discutida em cadeiras científicas. Mas a resolução de um problema pode ser muito pouco esclarecedora quanto aos processos mentais que a ela conduziram. Com efeito, embora a resolução implique a apresentação de um dado fio de raciocínio, não há normalmente a indicação de como este foi encontrado, de como foi preferido face a outros possíveis ou ainda de como foram evitados impasses ou vias alternativas.

Ora são precisamente estes os aspectos que o estudante deve aprender se pretendemos que ele possa vir por sua vez a ser capaz de resolver novos problemas. E tais processos mentais não são quase nunca ensinados. Não é pois de admirar que tantos estudantes tenham grande dificuldade em resolver problemas e assim permaneçam pela vida fora.

A resolução de problemas envolve os seguintes processos de raciocínio:

— Dispôr os dados do problema de modo a facilitar a sua resolução

— Tomada criteriosa de decisões durante a busca de solução

— Testar e rever a solução.

Investigações recentes em ciência cognitiva [11] puderam elucidar algum destes processos levando a aplicações no ensino da Física [12], da Matemática [13] e da Biologia [14]. Referirei aqui brevemente alguns exemplos relevantes para a Física.

A forma de pôr um problema pode ser determinante no seu grau de dificuldade.

Os especialistas têm uma tendência quase inconsciente para reformular os enunciados dos problemas, o que para um estudante é muito difícil. Num dos nossos estudos [15], estudantes que haviam recentemente frequentado uma cadeira básica de Física com bom aproveitamento (grau B ou melhor) foram defrontados com problemas de Mecânica semelhantes aos resolvidos nessa cadeira. Cerca de metade das resoluções estava errada, devido a uma interpretação incorrecta dos movimentos ou das forças (vd. figura 5).

A nossa análise sugere que será possível obter processos explícitos de reformulação de problemas para qualquer área. No caso referido, apresentámos um procedimento aplicável a todos os problemas da Mecânica Elementar. Este, muito mais explícito do que as indicações sumárias normalmente dadas, especifica a descrição do movimento e das forças, identifica todas as interacções que originam forças, explica as propriedades gerais das forças e mostra como verificar a consistência das descrições em termos de forças e movimento. A eficácia deste processo foi testada [15] recorrendo a condições experimentais controladas que assegurassem o seu emprego na resolução de vários problemas, de que é exemplo o da figura 6. Como se mostra na figura 5, sempre que os estudantes utilizaram métodos menos directos do que o procedimento explícito, a sua capacidade de resolução foi menor.

A grande dificuldade na resolução de problemas está na necessidade de tomar decisões criteriosas que permitam, de entre os muitos caminhos possíveis, escolher aquele que leva à solução.

Embora não haja receitas que assegurem decisões acertadas, existem métodos sistemáticos [10,11] que simplificam bastante a procura da solução, especialmente se comparados com os «métodos» de muitos estudantes. Em particular é útil fazer pontos da situação frequentes, em que se determinam as dificuldades existentes, por exemplo a ausência de equações necessárias ou a presença de variáveis indesejadas. Nesta altura é possível tentar resolver sub-problemas com o fim de eliminar pelo menos algumas das dificuldades. Além disso, o especialista tem normalmente tendência a abordar um problema por aproximações sucessivas: são inicialmente obtidas soluções esquemáticas que servem de orientação para chegar à solução final, muito mais pormenorizada. Os estudantes raramente procedem deste modo.

Estes métodos de decisão e planeamento quase não são ensinados em cadeiras científicas, embora tenha havido algumas tentativas recentes [14] de o fazer em contextos especiais. Alguns métodos de ensino prevalentes em matemática e nas ciências físicas podem mesmo ser nocivos, dada a sua insistência no simbolismo matemático e na formulação quantitativa dos problemas. Há assim uma tendência por parte do estudante para decorar colecções de fórmulas, desencorajando-o a raciocinar qualitativamente, o que é importante no planeamento e resolução de problemas pelo processo das aproximações sucessivas.

Ensino baseado em princípios

A compreensão dos processos de raciocínio necessários a uma boa aptidão intelectual numa dada disciplina deve levar à elaboração de métodos eficazes de ensino desses mesmos processos. Os ensaios educacionais baseados numa tal abordagem sistemática apresentam-se como bastante promissores. Alguns destes ensaios, bem sintetizados num artigo de revisão recente [16], concentraram-se na leitura e na escrita de textos escolares em que a comunicação seja efectiva, bem como no ensino de técnicas de resolução de problemas.

No trabalho sobre a leitura, por exemplo, identificaram-se e foram indicados explicitamente [17] processos de clarificar, resumir e prever que os leitores podem utilizar para extrair conhecimento significativo de um dado texto. Os estudos revelaram um novo método, dito de «ensino recíproco», em que instrutor e aluno fazem à vez de professor. Este método, de aplicação imediata em ensino científico, é muito eficaz pois força os estudantes a uma participação activa, em que o seu comportamento e forma de pensar são claramente expressos. Além disso torna-os críticos e criativos, e a presença do instrutor não deixa perguntas sem resposta. O estudante torna-se progressivamente mais independente à medida que o instrutor lhe vai dando menos apoio. Em resultado deste ensino sistemático, os índices médios de compreensão escrita subiram de 15% para 85% depois de vinte sessões de treino e mantinham-se a 60% seis meses depois. Mesmo em alguns ensaios menos individualizados envolvendo salas de aula inteiras, os índices aumentaram de 40 para 75%. Estes resultados são impressionantes para qualquer técnica de ensino.

Os computadores podem ser muito úteis no estudo e aplicação dos métodos educacionais. A investigação sobre o ensino pode ser tornada mais rigorosa e mais

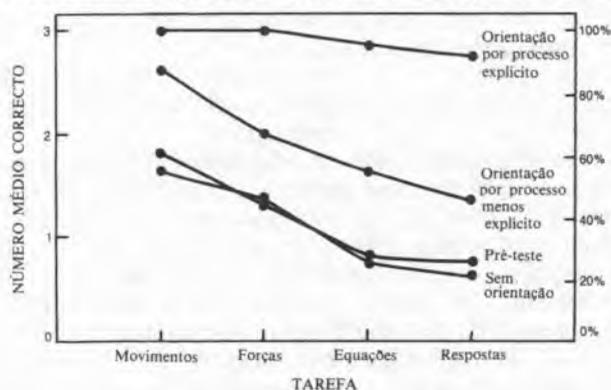


Figura 5

Classificação em problemas de física de estudantes orientados por vários métodos. Os pontos indicam o número médio de soluções correctas (em três) relativamente ao movimento, forças, equações e respostas

explícita se os modelos puderem ser postos sob a forma de programas de computador. O computador também permite controlar melhor as condições em que se desenrolam as experiências pedagógicas. Os computadores permitem aos estudantes [18] explorar de forma activa novas ideias e portanto desenvolver a intuição e a percepção dos problemas. Os computadores podem além disso desempenhar o papel de instrutores pessoais [19], especialmente quando os programas têm em conta análises cognitivas e exploram técnicas da inteligência artificial. Estes instrutores cibernéticos foram concebidos e utilizados recentemente [20] no ensino de geometria e da linguagem LISP.

Perspectivas e obstáculos

Todas as tentativas descritas neste artigo são no sentido de basear o ensino numa compreensão dos processos de pensamento. Procura-se estudar os problemas educacionais através de análises teóricas e de investigações experimentais, de generalizar abordagens sistemáticas existentes em alguns campos da ciência e de ultrapassar pois ideias apenas nascidas da experiência e de noções intuitivas [21]. Muitos ramos do conhecimento como a Física, a Metalurgia, a Agricultura ou a Medicina, começaram por ser artes, ofícios ou especulações filosóficas, mas evoluíram gradualmente para ciências com suporte teórico e larga aplicação prática. Não há razão para crer que o mesmo não possa suceder com a Educação, que se poderá tornar pelo menos comparável à Medicina moderna ou mesmo tão bem sucedida como a Física Aplicada.

Parece especialmente adequado fazer um balanço no momento actual. Progressos recentes [22] em ciências cognitivas como a psicologia do processamento de informação, inteligência artificial e linguística abriram novas perspectivas na compreensão dos mecanismos do pensamento.

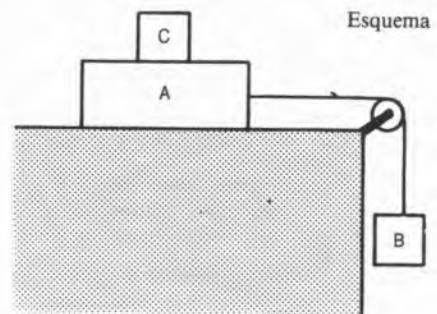
Acrescem os avanços espectaculares nas tecnologias da informação — sobretudo nos computadores — que põem à nossa disposição ferramentas poderosas em investigação e ensino. Tudo isto permite abordar de forma mais racional os problemas do ensino da ciência.

E tem-se evoluído: estabeleceram-se muitos pontos centrais do ensino; vários métodos de ensino prejudiciais foram identificados como tal; compreenderam-se melhor processos cognitivos complexos; e ensaiaram-se algumas técnicas de ensino promissoras. Estes resultados são, no seu conjunto, muito encorajadores, mas seria descabido pretender que são mais do que um começo. Por outro lado, seria também errado, especialmente por parte de um cientista, tomar a posição de descrever nos efeitos a longo prazo de uma abordagem sistemática.

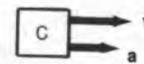
Há alguns obstáculos importantes ao desenvolvimento desta abordagem. O maior destes é talvez a falta de talentos. O progresso em qualquer campo, seja ele a Física, a Biologia Molecular, a Medicina ou outro, depende muitíssimo da existência de grupos de dimensão razoável constituídos por pessoas dotadas. Este problema é especialmente grave em Educação por a exploração das várias novas direcções exigir conhecimentos profundos em várias áreas: matemática e ciências naturais, informática e inteligência artificial, pedagogia e ciências sociais. O número de pessoas com uma tal combinação de qualificações é bastante reduzido. E só em muito poucos sítios, como a Universidade da Cali-

fórnia em Berkeley, a Universidade de Pittsburgo ou a Universidade Carnegie-Mellon, existem embriões de grupos interdisciplinares onde todas as áreas referidas estão representadas. Este problema levou a que há pouco tempo se emitissem várias recomendações [23] no sentido de se estabelecerem Centros Nacionais semelhantes aos existentes nos domínios da Engenharia e da Física Teórica e suportados pela *National Science Foundation*. O objectivo destes centros será o de se obterem progressos significativos no domínio do ensino através dos esforços conjuntos de vários peritos, a que será dada a necessária cobertura material. Está contudo por saber se estas recomendações irão ser seguidas. A falta de talentos é em última análise devida à escassez de estudantes preparados para trabalhar de forma inovadora na área da educação. Só lentamente as coisas têm vindo a mudar. Um punhado de universidades, como Berkeley, têm agora programas de doutoramento dedicados à aplicação das ciências cognitivas e da computação ao ensino das ciências.

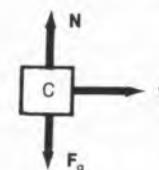
As oportunidades de emprego para alguém que se especialize numa tal área são cada vez maiores. Algumas estudantes com boas bases em matemática, física ou inteligência artificial começam a sentir-se atraídos pelo ensino moderno. Os melhores dentre estes são aqueles que se afastam das carreiras científicas mais tradicionais pois aperceberam-se da vasta área inexplorada que é a Educação, recheada de desafios intelectuais, ferramentas científicas e tecnológicas por aplicar e com importantíssimas implicações sociais. Precisaremos contudo de muito mais desses estudantes para que a Educação possa vir a ter o grande desenvolvimento que lhes auguramos.



Esquema



Movimento de C



Forças em C

Figura 6

Um dos problemas usados nos ensaios da Figura 5. As perguntas referem-se ao bloco C. Os diagramas inferiores indicam o movimento e as forças que actuam neste bloco. Os estudantes respondem com frequência que a força de atrito está dirigida para a esquerda. O processo de descrição referido evita erros deste tipo pois explica as propriedades das forças e faz os alunos verificarem se estas são coerentes com as acelerações

BIBLIOGRAFIA

1. Veja-se, por exemplo, M. McCloskey, A. Caramazza, B. Green, *Science* **210**, 1139 (1980). D.E. Trowbridge, L.C. McDermott, *Am. J. Phys.* **48**, 1020 (1980); *Am. J. Phys.* **49**, 242 (1981). R. Cohen, B. Eylon, U. Ganiel, *Am. J. Phys.* **51**, 407 (1983). L.C. McDermott, *Physics Today*, Julho 1984, p. 24. I.A. Halloun, D. Hestenes, *Am. J. Phys.* **53**, 1043, 1056 (1985).
2. L. Viennot, *Eur. J. Sci. Educ.* **1**, 205 (1979). J. Clement, *Am. J. Phys.* **50**, 66 (1982). A. diSessa, *Cognitive Sci.* **6**, 37 (1982). A. diSessa, in *Mental Models*, D. Gentner, A. Stevens, eds., Erlbaum, Hillsdale, N.J. (1983), p. 15. M. McCloskey, *Sci. Am.*, Abril 1983, p. 122. *Research on Physics Education: Proc. First Int. Wksp.*, Centre National de la Recherche Scientifique, Paris (1983). R. Driver, E. Guesne, A. Tiberghien, eds., *Children's Ideas about the Physical World*, Open U.P., Milton Keynes, England (1985).
3. D. Kahnemann, A. Tversky, in *Judgment under Uncertainty: Heuristics and Biases*, D. Kahnemann, A. Tversky, P. Slovic, eds., Cambridge U.P., Cambridge, England (1982), p. 493. D.B. Karbo, E.D. Hobbs, G.L. Erickson, *J. Biol. Educ.* **14**, 137 (1980). H. Helms; J.D. Novak, eds., *Proc. Int. Sem. on Misconceptions in Science and Mathematics*, Cornell Univ., Ithaca, N.Y. (1983).
4. A. diSessa, in *Constructivism in the Computer Age*, G. Forman, ed., Erlbaum, Hillsdale, N.J. (1986).
5. *Proc. 5th Int. Joint Conf. on Artificial Intelligence*, MIT, Cambridge, Mass. (1977): artigos de J. deKleer, p. 299 e de G.S. Novak, p. 286.
6. P. Labudde, F. Reif, L. Quinn, *Facilitation of Scientific Concept Learning by Interpretation Procedures and Diagnosis*, report CES-4, School of Education, Univ. Calif., Berkeley (1986).
7. F. Reif, *Interpretation of Scientific or Mathematical Concepts: Cognitive Issues and Instructional Implications*, report CES-1, School of Education, Univ. Calif., Berkeley (1986). F. Reif, in *Cognitive Structure and Conceptual Change*, L.H.T. West, A.L. Pines, eds., Academic, New York (1985), p. 133.
8. B. Eylon, F. Reif, *Cognition and Instruction* **1**, 5 (1984).
9. J.K. Hughes, J.I. Michton, *A Structured Approach to Programming*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1977).
10. F. Reif, J.I. Heller, *Educ. Psychologist* **17**, 102 (1982).
11. A. Newell, H.A. Simon, *Human Problem Solving*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1972). J.G. Greeno, H.A. Simon, in *Stevens' Handbook of Experimental Psychology* (rev. ed.), R.C. Atkinson, R. Herrnstein, G. Lindzey, eds., Wiley, New York (1986). D. Tuma, F. Reif, eds., *Problem Solving and Education: Issues in Teaching and Research*, Erlbaum, Hillsdale, N.J. (1980).
12. J.H. Larkin, J. McDermott, D.P. Simon, H.A. Simon, *Science* **208**, 1335 (1980). M.T.H. Chi, R. Glaser, E. Rees, in *Advances in the Psychology of Human Intelligence*, R. Sternberg, ed., Erlbaum, Hillsdale, N.J. (1981). F. Reif, in *Research on Physics Education: Proc. First Int. Wksp.*, Centre National de la Recherche Scientifique, Paris (1983), p. 15.
13. A.H. Schoenfeld, *Mathematical Problem Solving*. Academic, New York (1985).
14. N. Thomson, J. Stewart, *J. Biol. Educ.* **19**, 53 (1985).
15. J.I. Heller, F. Reif, *Cognition and Instruction* **1**, 177 (1984).
16. A. Collins, J.S. Brown, in *Cognition and Instruction: Issues and Agendas*, L.B. Resnick, ed., Erlbaum, Hillsdale, N.J. (1986), em publicação.
17. A.S. Palincsar, A.L. Brown, *Cognition and Instruction* **1**, 117 (1984). A.L. Brown, A.S. Palincsar, in *Intelligence and Cognition in Special Children: Comparative Studies of Giftedness, Mental Retardation, and Learning Disabilities*, J.B. Borkowski, J.D. Day, eds. Ablex, Norwood, N.J. (1986), em publicação.
18. S. Papert, *Mindstorms: Children, Computers and Powerful Ideas*, Basic, New York (1980). A. diSessa, *Cognitive Sci.* **6**, 37 (1982). B. White, *Cognition and Instruction*, **1**, 69 (1984).
19. D. Sleeman, J.S. Brown, *Intelligent Tutoring Systems*, Academic, New York (1982).
20. J.R. Anderson, C.F. Boyle, B.J. Reiser, *Science* **228**, 458 (1985). J.R. Anderson, B.J. Reiser, *Byte* **10**, 159 (Abril 1985).
21. L.B. Resnick, *Science* **220**, 477 (1983).
22. H. Gardner, *The Mind's New Science: A History of the Cognitive Revolution*, Basic, New York (1985).
23. National Academy of Sciences, *Research Briefings 1984*, Natl. Acad. P. Washington, DC (1984), p. 17. M.C. Linn, ed., *Establishing a Research Base for Science Education: Challenges. Trends and Recommendations*, Lawrence Hall of Science, Univ. Calif., Berkeley (1986).

Iniciamos neste exemplar do boletim uma nova rubrica cujo objectivo é contribuir para a publicação de um léxico científico actualizado, e que se deverá prolongar por mais alguns números — se entretanto o director deste boletim não for demitido por publicar coisas destas...

Os vocábulos agora descritos são produto da nossa reflexão. Já no próximo número contamos apresentar algo de mais profundo, resultante da recolha de termos científicos, que estamos a efectuar nos Jornais e na T.V.

Aproveitamos para protestar pelo facto das entidades oficiais se terem recusado a financiar este projecto, quando outros igualmente divertidos ou ainda mais sérios, foram contemplados... mais vale cair em graça que ser engraçado...

Florêncio Vesúvio
Professor

Contribuição para um novo léxico científico ...em desordem alfabética

Super visão — Visão de raios X do super homem

Raios gama — Expressão utilizada pelo Dr. Victor Constâncio quando se indispôs com o Dr. Jaime Gama

Fitar uma curva * — Acto de olhar fixamente para a dita.

Corante — Que se envergonha ao ponto de enrubescer

Spins que alinham — Em oposição àqueles que são uns «chatos»

Mole — Conjunto de moléculas que se torna macio

Espectro — Pessoa macilenta e magra

Padrão — Padre muito grande

Amostra — Quando pedimos para ver

Dados — Aquisição que não foi necessário pagar

Momento de transição — Eufemismo que designa a passagem de 24 para 25 de Abril de 1974

Modelos químicos — Beldades licenciadas em Química

Reflexão — Acto de meditar sobre o tema da simetria

Rotação — Acto de andar às voltas com a simetria

Inversão — Desvio patológico que leva uma molécula a ter afinidades por outra igual

Grupos pontuais de simetria — Conjunto de estudiosos de simetria que chega sempre a horas

Representação dos grupos pontuais de simetria —

Quando os grupos anteriores fazem a récita anual

Semi-condutor — Aquele que conduz às segundas, quartas e sextas-feiras.

* Gentilmente cedido pelo Professor Tertuliano Malmequer

Clarificação de conceitos fundamentais em Cinética Química

Lídia M.P.C. Albuquerque e
Raquel M.C. Gonçalves^a

1. Introdução

No ensino da Cinética Química são utilizados correntemente algumas simplificações, as quais, se não forem acompanhadas do registo dos respectivos limites de aplicabilidade, podem conduzir a erros graves. É o caso, por exemplo, das leis de velocidade de reacções químicas de ordem bem definida ou da definição de passo determinante da velocidade reaccional (1-3).

Por outro lado, no cálculo de funções termodinâmicas de activação, quer se trate do parâmetro de Arrhenius, E_a , obtido pela expressão empírica:

$$\ln k = \ln A - E_a/RT \quad [1]$$

onde A representa o número de colisão, quer da entalpia, entropia, capacidade calorífica, volume, etc., por aplicação do formalismo termodinâmico à equação fundamental da Teoria do Estado de Transição,

$$\ln k = \ln \left(\frac{RT}{N_A} K \neq/h \right) \quad [2]$$

sendo $RT/N_A h$ o factor de frequência universal e $K \neq$ uma pseudo-constante de equilíbrio, têm-se detectado fontes de erro que residem na utilização de valores de constantes de velocidade expressas em diferentes unidades (1,4,5).

2. Desenvolvimento

2.1. Ordem de reacção

É comum considerar equivalentes as expressões « reacção química de ordem n em relação ao reagente A » e « $-dC_A/dt = k C_A^n$ ».

No entanto, se se escrever a equação de balanço energético aplicável a A , num elemento de volume dV , num tempo dt :

$$dn_A = dn_A(I) - dn_A(II) + dn_A(III) - dn_A(IV) \quad [3]$$

na qual,

dn_A — aumento do n.º de moles de A em dV ,

durante dt

$dn_A(I)$ — n.º de moles de A que entram em dV ,

durante dt

$dn_A(II)$ — n.º de moles de A que deixam dV ,

durante dt

$dn_A(III)$ — n.º de moles de A produzidas em dV ,

durante dt

$dn_A(IV)$ — n.º de moles de A destruídas em dV ,

durante dt ,

sendo os processos (I) e (II) de transporte de massa e (III) e (IV) reaccionais, é evidente que a lei cinética se deverá referir exclusivamente ao último termo, isto é,

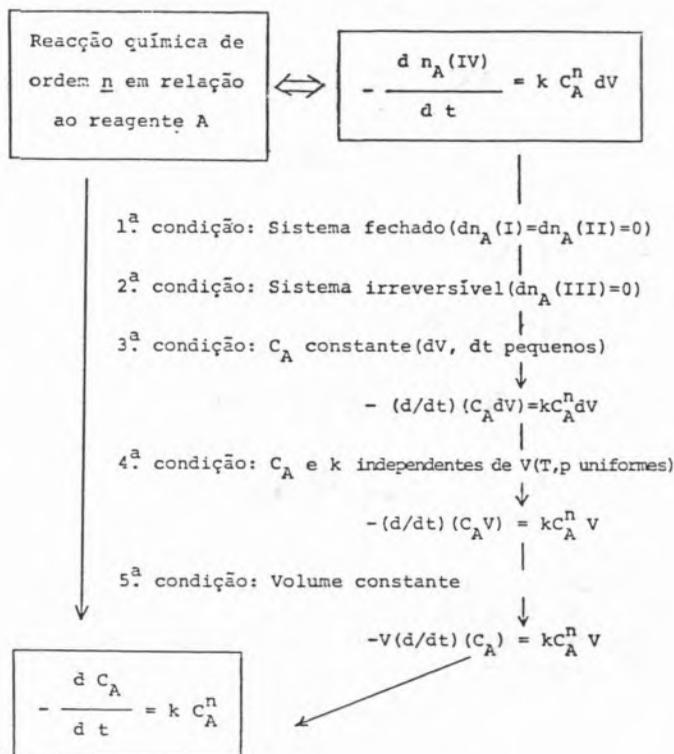
$$-dn_A(IV)/dt = k C_A^n dV \quad [4]$$

Esta equação apenas se reduzirá à inicial se forem cumpridas certas condições, tal como se indica no esquema 1.

Pode concluir-se, então, que a lei de velocidade, $-dC_A/dt = k C_A^n$ só é aplicável a uma reacção de ordem n se esta for cineticamente irreversível, conduzida a volume constante e em condições de temperatura e pressão uniformes.

A maioria dos estudos cinéticos de investigação e de ensino são efectuados em vasos reaccionais a temperatura constante. Nas reacções em fase gasosa é usual manter-se constante o volume e em fase líquida a pressão, embora, neste último caso, variações de volume se possam considerar, em geral, desprezáveis.

As condições requeridas ao uso daquela expressão são, pois, na prática, aproximadamente cumpridas, o que não invalida o facto de ser necessário, pelo menos em termos teóricos, chamar a atenção para os limites de aplicabilidade das vulgarizadas leis cinéticas.



Esquema 1

Lei de velocidade de uma reacção de ordem n

^a CECUL — Calçada Bento da Rocha Cabral, 14, 1200 Lisboa.

2.2 Constantes de velocidades e funções termodinâmicas de activação

A constante de velocidade tem dimensões dependentes da forma da lei de velocidade e do modo como a reacção foi investigada — Tabela 1.

Ordem de reacção	Unidades de k	SI
1	(tempo) ⁻¹	s ⁻¹
2	(concentração) ⁻¹ (tempo) ⁻¹	dm ³ mol ⁻¹ s ⁻¹
n	(concentração) ¹⁻ⁿ (tempo) ⁻¹	dm ³⁽ⁿ⁻¹⁾ mol ¹⁻ⁿ s ⁻¹

Tabela 1
Unidades da constante de velocidade

Ao contrário do que acontece para reacções de 1.^a ordem, as unidades da constante de velocidade de reacções de ordem superior dependem das unidades em que estão expressas as concentrações. Três diferentes escalas de concentração são de uso comum: molar, c, molar, m, e de fracções molares, x. A relação entre escalas é simples quando se trata de soluções diluídas

$$x = Mc / 1000\rho = Mm / 1000 \quad [5]$$

onde M representa a massa molecular e ρ a massa específica, ambas do solvente puro.

A correspondente conversão de constantes de velocidade pode ser feita recorrendo às igualdades:

$$k_x = k_c (M/1000\rho)^{1-n} = k_m (M/1000)^{1-n} \quad [6]$$

A determinação de funções termodinâmicas de activação a partir da variação da constante de velocidade com as variáveis experimentais temperatura e pressão baseia-se, sempre, em expressões que incluem $\ln[f(k)]$, factor este que, por definição, não tem unidades:

$$\Delta^*G = -RT \ln \left[\frac{h}{k_B} \left(\frac{k}{T} \right) \right]_p \quad [7]$$

$$\Delta^*H = RT^2 \left[\frac{\partial \ln(k/T)}{\partial T} \right]_p \quad [8]$$

$$\Delta^*S = - \left(\frac{\partial \Delta^*G}{\partial T} \right)_p = R \ln (h/k_B) + R \left\{ \frac{\partial [T \ln(k/T)]}{\partial T} \right\}_p \quad [9]$$

$$\Delta^*Cp = \left(\frac{\partial \Delta^*H}{\partial T} \right)_p = R \left\{ \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial \ln(k/T)}{\partial T} \right] \right\}_p \quad [10]$$

$$\Delta^*V = \left(\frac{\partial \Delta^*G}{\partial p} \right)_T = -RT \left(\frac{\partial \ln k}{\partial p} \right)_T \quad [11]$$

Apenas pontualmente os valores das funções termodinâmicas de activação são independentes das unidades de concentração segundo as quais k foi definido. São disso exemplo as seguintes igualdades:

$$\Delta^*H_x = \Delta^*H_m \quad [12]$$

$$\Delta^*Cp_x = \Delta^*Cp_m \quad [13]$$

$$\Delta^*V_x = \Delta^*V_m \quad [14]$$

Em geral, no entanto, dependem:

$$\begin{aligned} \Delta^*G_x &= \Delta^*G_c - RT [(1-n) \ln (M/1000\rho)] = \\ &= \Delta^*G_m - RT [(1-n) \ln(M/1000)] \end{aligned} \quad [15]$$

$$\Delta^*H_x = \Delta^*H_c + RT^2(1-n) \rho \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{1}{\rho} \right) \quad [16]$$

$$\begin{aligned} \Delta^*S_x &= \Delta^*S_c + R(1-n) \left[T \rho \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{1}{\rho} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \ln(M/1000\rho) \right] = \\ &= \Delta^*S_m + R(1-n) \ln(M/1000) \end{aligned} \quad [17]$$

$$\begin{aligned} \Delta^*Cp_x &= \Delta^*Cp_c + RT(1-n) \left\{ 2\rho \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{1}{\rho} \right) + \right. \\ &\quad \left. + T \left[\rho \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(-\frac{1}{\rho} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial T} \cdot \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{1}{\rho} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad [18]$$

$$\Delta^*V_x = \Delta^*V_c - RT(1-n) \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left(-\frac{1}{\rho} \right) \quad [19]$$

As equações [12] a [19] foram deduzidas directamente das expressões [6] a [11].

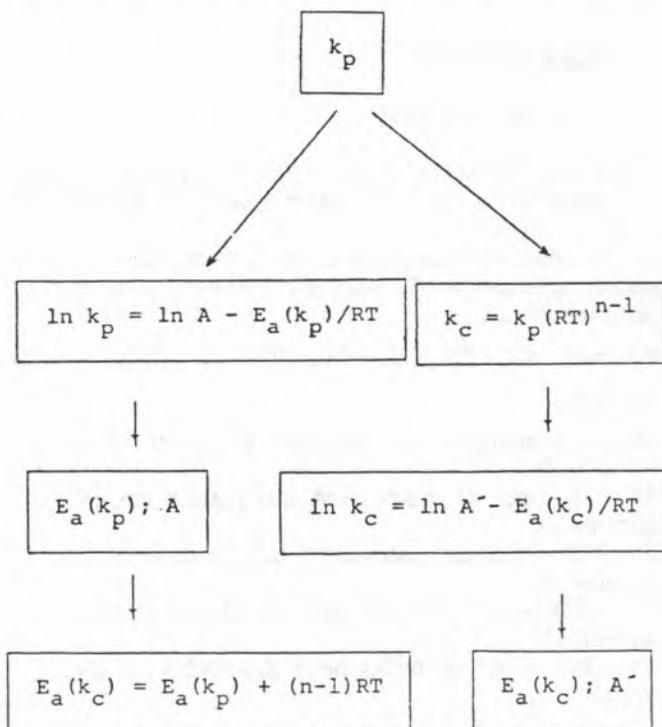
Embora os valores das funções termodinâmicas de activação se apresentem, quase sempre, numericamente diferentes consoante as unidades de concentração utilizadas, como vimos, expressam-se nas mesmas unidades: Jmol⁻¹ para a energia de Gibbs e entalpia, Jmol⁻¹ K⁻¹ para a entropia e capacidade calorífica e m³ mol⁻¹ para o volume, no Sistema Internacional.

Por outro lado, as constantes de velocidade de reacções de ordem n em fase gasosa expressam-se, por vezes, em unidades de pressão:

$$k_p / (\text{pressão})^{1-n} (\text{tempo})^{-1}$$

O cálculo do parâmetro de Arrhenius, E_a , pode ser feito por duas vias que se indicam no esquema 2.

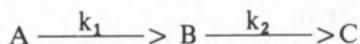
Como se vê neste esquema, a utilização de k_p no gráfico de Arrhenius conduz a números de colisão diferentes ($A/(\text{pressão})^{1-n} (\text{tempo})^{-1} \neq A' / (\text{concentração})^{-1} (\text{tempo})^{-1}$) e também a parâmetros de activação de Arrhenius, $E_a(k_p)$ e $E_a(k_c)$ numericamente diferentes, embora expressas nas mesmas unidades.



Esquema 2
Cálculo de E_a a partir de k_p

2.3 Passo determinante da velocidade de reação

O passo determinante da velocidade da reação é habitualmente definido como sendo «o mais lento». Este critério, no entanto, só é útil em sequências de etapas irreversíveis e, mesmo aí, convém explicitar o significado de «o mais lento». No caso simples de duas reações irreversíveis consecutivas de 1.^a ordem:



uma formulação puramente algébrica, fazendo uso da hipótese de que ao tempo zero, a concentração do reagente A é $[A_0]$ e as de B e C são nulas, conduz a:

$$[A] = [A_0] e^{-k_1 t} \quad [20]$$

$$[B] = [A_0] k_1 (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) / (k_2 - k_1) \quad [21]$$

$$[C] = [A_0] [1 + (k_2 e^{-k_1 t} - k_1 e^{-k_2 t}) / (k_2 - k_1)] \quad [22]$$

o que se traduziu graficamente na figura 1.

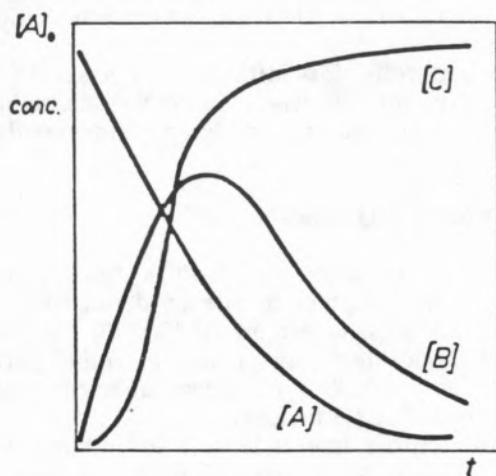


Figura 1
Variação da concentração do reagente A, intermediário B e produto C com o tempo

No caso particular de $k_1 \ll k_2$, as equações anteriores reduzem-se a:

$$[A] = [A_0] e^{-k_1 t} \quad [23]$$

$$[B] = [A_0] k_1 e^{-k_1 t} / k_2 = [A] k_1 / k_2 \quad [24]$$

$$[C] = [A_0] (1 - e^{-k_1 t}) \quad [25]$$

Por uma via independente, aplicando o Princípio do Estado Estacionário ao intermediário B,

$$d[B] / dt = k_1 [A] - k_2 [B] = 0$$

isto é, considerando a velocidade do primeiro passo reaccional, $v_1 = k_1 [A]$, igual à do segundo, $v_2 = k_2 [B]$, obtém-se o mesmo conjunto de leis cinéticas (equações [23] a [25]).

Nenhuma contradição está implícita no formalismo simultâneo de $k_1 \ll k_2$ e $v_1 = v_2$ desde que se considere $[B] \ll [A]$ durante todo o decurso da reação. A figura 2 exemplifica este caso, entre outros.

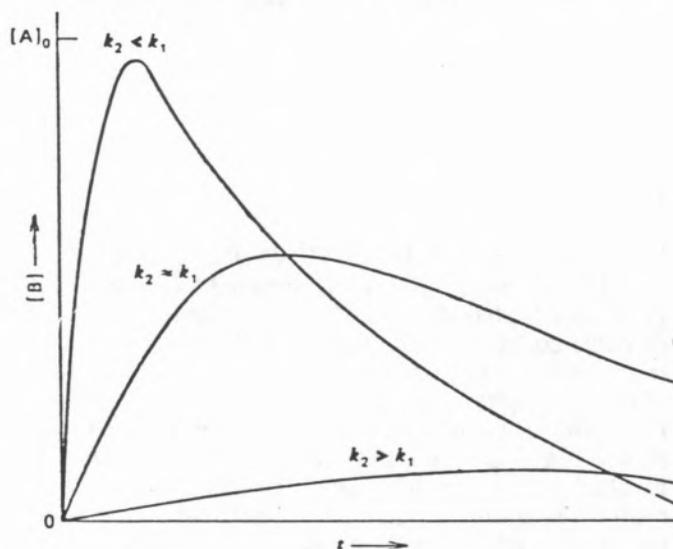


Figura 2
Variação da concentração do intermediário B com o tempo

Consequentemente, o conceito de passo determinante da velocidade reaccional numa sequência de etapas irreversíveis deve ser feito em termos de constantes de velocidade e não de velocidades: o passo «mais lento» é o que apresenta menor valor de constante de velocidade.

Em sistemas mais complexos, reações reversíveis consecutivas, paralelas e competitivas, não é possível uma definição simples de passo determinante de velocidade de reação e apenas um exame pormenorizado da estrutura algébrica das equações cinéticas poderá, eventualmente, conduzir à sua identificação.

REFERÊNCIAS

- (1) R.K. Boyd, *J. Chem. Educ.*, 55, 84 (1978).
- (2) K. Denbigh, «*The Principles of Chemical Equilibrium*», Cambridge University Press, 3.^a ed., (1971).
- (3) P. Zuman e R. Patel, «*Techniques in Organic Reaction Kinetics*», John Wiley, New York (1984).
- (4) M.H. Abraham, *Prog. Phys. Org. Chem.*, 11, 1 (1974).
- (5) H. Maskill, *Educ. Chem.*, 22, 154 (1985).

Newton e a Química

No Tri-centenário dos *Principia Mathematica*

A. M. Amorim da Costa ^a

1. Introdução

Em 1687, publicou Isaac NEWTON (1642-1727) os seus *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* (Os Princípios Matemáticos da Filosofia Natural), abreviadamente conhecidos por *Principia Mathematica* que seriam reeditados, pelo próprio autor, em 1713 e em 1726, com algumas emendas e adendas (ref. 1). Marco milenário da história das ciências e compêndio fundamental da síntese da ciência moderna emergente da revolução científica dos séculos XV-XVII, os *Principia Mathematica* são formados por três livros, onde a partir de um certo número de definições e axiomas que revelam pela primeira vez os conceitos básicos da mecânica, tais como força, movimento e massa, são enunciadas as três leis do movimento, fundamento da dinâmica clássica: a lei da inércia, a relação fundamental da dinâmica e a lei da igualdade da acção e da reacção.

O livro I trata dos movimentos dos corpos em meios sem resistência, nele se formulando a teoria matemática em que se baseia a mecânica celeste; o livro II trata dos corpos em movimento num meio resistente, isto é, nos fluidos; o livro III aplica as teorias mecânicas que estabelecera aos problemas da astronomia, demonstrando a composição do sistema do Mundo.

No Prefácio de tão importante obra, diz o seu autor: «proponho este trabalho como princípios matemáticos da filosofia, já que o principal problema da filosofia parece ser este — investigar as forças da natureza a partir dos fenómenos do movimento, e depois, a partir dessas forças, demonstrar os outros fenómenos; (...) Gostaria que pudéssemos derivar o resto dos fenómenos da natureza pela mesma espécie de raciocínio a partir de princípios mecânicos, pois sou levado por muitas razões a suspeitar que todos eles podem depender de certas forças pelas quais as partículas dos corpos, por causas até aqui desconhecidas, são ou mutuamente impelidas umas para as outras, e convergem em figuras regulares, ou são repelidas e afastam-se umas das outras» (ref. 1-a), *Auctoris Praefatio ad lectorem*. Daqui se conclui que Newton depois de ter explicado os fenómenos celestes pela atracção universal exercida pela força da gravidade, uma força de longo-alcance, admitia a existência de idêntico tipo de forças, mas de curto alcance, que actuaria entre as partículas constituintes de todos os corpos. Quer dizer, depois de ter mostrado que são as mesmas as leis que presidem aos fenómenos celestes e aos fenómenos terrestres, as leis que governam o movimento dos planetas e as leis que governam a queda de qualquer corpo à face da terra, englobando os planetas e o mais pequeno dos seixos no mesmo esquema compreensivo das coisas e tornando

definitivamente obsoleta a distinção de Aristóteles entre um mundo sublunar e um mundo supralunar regidos por leis diferentes, Newton confessa-se convicto de que seriam também as mesmas as leis que presidem aos fenómenos galácticos e as leis que presidem aos fenómenos químicos, a nível da composição última da matéria.

Porque esta convicção informa toda a sua teoria da matéria, é no âmbito dela que deve ser analisado o seu principal contributo para o desenvolvimento da Química moderna.

2. Newton e a Química

Carácter imensamente reservado e tímido, antes e depois de ter ocupado a cátedra de matemática do culto e viajado Isaac Barrow (1630-1677), na Universidade de Cambridge, Newton nutriu sempre particular interesse por trabalhos de física, química, alquimia, cosmologia bíblica e teologia.

Dos seus escritos, depreende-se facilmente que Newton leu devotadamente os mais afamados tratados alquimistas então conhecidos, citando muitos deles, nomeadamente os escritos de Abraão, o Judeu, de Basílio Valentim, de Bernardo-o-Trevisano, de Flamel, de Maier, de Sendivogius, etc. (ref. 2). Muito provavelmente, o seu principal interesse pela alquimia terá tido por base o facto de esta ser para ele uma espécie de química fundamental; terá procurado nos textos, figuras e símbolos alquímicos princípios químicos que pudessem ser postos em prática no laboratório, aceitando sem grandes objecções muito da filosofia alquimista do universo.

Muito concretamente, referindo-se à possibilidade da transmutação dos metais, na sequência da sua concepção relativa à composição última da matéria, a que faremos referência mais adiante, Newton defendeu que tal fenómeno ocorre no seio da terra, sob acção de processos naturais para os quais não tinha explicação, notando que «a matéria de todas as coisas é uma só e a mesma, que se transmuta em formas sem conta por operações da natureza» (ref. 3, pg. 341).

Considerando ainda a mesma possibilidade, na única publicação em que abordou especificamente assuntos de química, datada de 1692 e intitulada *De Natura Acidorum* (Da Natureza dos Ácidos), Newton refere-se a diversas tentativas infrutíferas no sentido de transmutar alguns metais em ouro por recurso a alguns ácidos, v.g., a água régia: «a Água Régia — diz ele — pode penetrar até aos Poros do Ouro e do Estanho que

^a Departamento de Química, Universidade de Coimbra, 3000 Coimbra.

existem entre as partículas da sua composição última, mas não consegue ir mais além... Se as partículas da primeira, ou talvez da segunda composição do ouro pudessem ser separadas, ... ele poderia ser transformado em qualquer outro corpo» (ref. 4, pg. 258).

Com esta citação somos levados à concepção de Newton relativa à estrutura da matéria, patente e expressa em vários dos seus escritos, com particular realce para o seu tratado sobre óptica (ref. 5).

Filosofando sobre a estrutura da matéria, Newton é um partidário das filosofias atomistas, com influência nítida dos antigos atomistas gregos, e dos primeiros atomistas da ciência moderna, com Boyle, Descartes, Gassendi e vários outros á cabeça (ref. 6). De facto, segundo Newton, toda a matéria seria, em última análise, constituída por partículas extremamente pequenas, imutáveis, com formatos e tamanhos diversos: «consideradas todas estas coisas, parece-me provável que Deus no Princípio formou a Matéria com Partículas sólidas, compactas, duras, impenetráveis e móveis, de Tamanhos e Figuras e outra Propriedades, e Proporção relativamente ao Espaço, tais que melhor servissem o Fim para o qual as formou; e que estas Partículas primitivas sendo sólidas, são incomparavelmente mais duras que quaisquer Corpos porosos delas compostos; de tal modo duras que nunca se rompem nem desfazem em bocados; nenhum Poder ordinário é capaz de dividir o que o próprio Deus fez uno aquando da Criação» (ref. 5, pg. 400).

Combinando-se entre si e com porções de espaço vazio entre elas, as partículas primitivas dariam origem a partículas maiores que por novas combinações entre si e com outras porções de espaços vazios e/ou com outras partículas primitivas, acabariam por dar origem às diversas espécies de matéria visível e invisível. Neste processo de associação, para formarem os diversos corpos naturais, «estas partículas não se juntam simplesmente como um montículo de pedras, mas coalescem com a forma de estruturas dotadas de elevado grau de regularidade, semelhantes a estruturas artísticas, como acontece na formação da neve e dos sais» (ref. 3, pg. 341).

As experiências e observações de Newton relativas aos fenómenos foram por ele usadas como suporte experimental destas suas especulações sobre a natureza última da matéria. Por esta razão, não surpreende que a maioria das considerações de Newton sobre a constituição da matéria se encontrem no seu tratado sobre óptica, como acima referimos. Tal como os corpos naturais, também a luz, uma *substância* e não simples *qualidade* dos corpos (ref. 4, pg. 57) seria constituída, em última análise, por partículas. O facto de muitos corpos *aparentemente* sólidos (v.g., o vidro) serem transparentes, isto é, permitirem a passagem através de si das partículas luminosas, era para Newton uma explicação plausível da formação dos mesmos a partir das partículas primitivas, segundo o processo de combinação acima descrito, com lugar para grande número de poros (ref. 1, Lib. I, prop. XCVI, th. L).

O agregado formado a partir das partículas primitivas em que consistem os corpos naturais, seria estável devido a forças de curto alcance actuantes através dos espaços vazios entre as partículas constituintes.

A observação e determinação exacta dos movimentos dos astros permitira a Newton estabelecer relações quantitativas associadas à natureza das forças gravitacionais de longo alcance. Porque lhe não era possível observar e determinar o movimento das partículas

constitutivas dos corpos, não lhe era possível pronunciar-se conclusivamente sobre a natureza das forças de curto alcance que entre elas actuam. Impunha-se «continuar a investigar diligentemente as suas causas e propriedades» (ref. 3, pg. 341).

Entretanto, numa base meramente especulativa e conjectural, admitia que as transformações químicas eram governadas pela acção dessas forças de curto alcance cuja consideração permitiria dar um tratamento quantitativo aos estudos químicos. Neste sentido, considerava que quanto menores fossem os agregados de partículas primitivas, maiores seriam as forças atractivas entre elas e, conseqüentemente, maior seria a coesão desses agregados. Com o crescimento dos agregados de partículas, por junção de agregados mais pequenos e maior número de espaços vazios entre os elementos constituintes, menor se tornaria a coesão do agregado formado. Deste modo, os corpos naturais seriam constituídos por sucessivos níveis de agregação, em que as forças de coesão cresceriam drasticamente dos mais externos para os mais internos.

Os agentes químicos usuais actuariam tão somente sobre corpos cuja composição compreendesse partículas relativamente grandes de tal sorte que a coesão da sua composição mais externa fosse relativamente pequena e, por consequência, facilmente vulnerável à acção dos mesmos. Por exemplo, o que caracteriza o ouro, ou qualquer outro metal, não seria a natureza intrínseca das partículas primitivas da sua primeira composição, mas a *configuração particular* resultante dessa mesma primeira composição que seria ditada fundamentalmente pelo formato e tamanho das partículas constituintes. Tal composição primeira das partículas constituintes seria dotada de tão elevada coesão que as reacções químicas «normais» não conseguiriam nunca afectá-la. Para a modificar seria preciso recorrer a processos extraordinários que não estão ao alcance das operações químicas do dia a dia de qualquer cientista, embora se trate de operações que ocorrem naturalmente, no seio da terra, ao longo de gerações e gerações.

As propriedades do ar (nomeadamente, a sua expansão sob a acção do calor e a asserção de que o seu volume é inversamente proporcional à pressão sobre ele exercida, asserção esta que — segundo o próprio Newton — Hooke havia provado experimentalmente) (ref. 3, pp. 223-225); a acção da água régia sobre o vitriolo; a acção do vitriolo ou da água régia sobre o sal comum ou nitro, ou sobre o ferro; a acção do ferro sobre o enxofre; a solubilização da prata ou do ouro pela água régia; a mistura de várias substâncias e a insolubilidade de outras, seriam alguns dos fenómenos químicos que Newton tentou explicar baseado nas forças que actuariam entre as partículas primitivas e seus agregados, forças essas que atingiriam distâncias tão pequenas que escapariam à nossa observação (ref. 7, pg. 136).

A teoria das *Afinidades Químicas* que tanta influência teve no desenvolvimento da química do século XVIII e princípios do século XIX, baseia-se fundamentalmente no projecto de Newton que acabámos de referir que tinha por objectivo a «investigação diligente das causas e propriedades» das forças de curto alcance responsáveis pela agregação das partículas primitivas na sua constituição dos corpos naturais.

De facto, com origem na dinâmica newtoniana estabeleceram-se paradigmas estruturais da matéria conducentes à criação de modelos interpretativos dos comportamentos químicos com base nas atracções e repul-

sões provocadas pelas forças de curto alcance inerentes à matéria. Embora o seu cálculo não fosse de imediato possível, antevia-se e afirmava-se a sua futura execução (ref. 8).

A afinidade química era, precisamente, a força com a qual os corpos de natureza diferente tendiam a combinar-se sob a acção de tais atracções e repulsões, medindo a tendência dos mesmos para reagir ou não entre si (ref. 9). De Geoffroy (1672-1731), com a sua *Table des Rapports*, publicada em 1718 (ref. 10), a Guyton de Morveau (1737-1816), com o seu tratado *Affinité*, publicado na *Encyclopédie Méthodique*, em 1786 (ref. 11), são numerosos os estudos experimentais que visam classificar as substâncias segundo a ordem relativa das suas afinidades, de maneira que as substâncias com maior afinidade seriam capazes de deslocar todas as de afinidade menor em compostos em que estas estivessem presentes. Para explicar e prever o comportamento químico das substâncias, organizaram-se, então, *Tabelas de Afinidades* e cuidou-se afanosamente do estabelecimento das leis segundo as quais se regeria o comportamento da afinidade química, de acordo com o estado físico das substâncias intervenientes, das suas concentrações e temperatura, no decurso dos variados tipos de transformações químicas.

Caberia à chamada *lei das proporções definidas*, formulada por John Dalton (1766-1844), em 1808 (ref. 12), mostrar que o paradigma das afinidades químicas definido exclusivamente na base duma atracção/repulsão newtoniana entre partículas, dependente apenas da massa e da distância entre as mesmas, era insuficiente para explicar a composição quantitativa das combinações químicas, composição esta que constituía o chamado *aspecto electivo* da afinidade química. Com efeito, muito mais que da massa e da distância das substâncias reactivas, a experiência mostrava que a composição quantitativa das reacções químicas dependia fundamentalmente das circunstâncias em que as mesmas se dessem, isto é, a experimentação analítica favorecia o princípio das proporções definidas de Dalton. O paradigma das afinidades químicas exigia um ajustamento. O tratamento quantitativo dos fenómenos químicos necessário ao estabelecimento da química como disciplina científica via-se forçado a não se circunscrever à tentativa de quantificação das forças entre partículas, na simples realização do projecto decorrente das teorias de Newton.

O paradigma das afinidades químicas de raiz e origem newtoniana seria substituído pelo paradigma do atomismo de Dalton em que a matéria era tratada como composta, em última análise, por átomos imutáveis que diferem entre si pelo seu *peso*. A cada elemento distinto corresponderiam átomos com *peso* característico, isto é, específico desse elemento. Da combinação de átomos resultariam as moléculas, unidades básicas dos compostos químicos. O interesse pelo estudo de *Tabelas de Afinidades Químicas* daria lugar a um redobrado interesse pelo estudo de *Tabelas de pesos Atómi-*

cos. Para trás ficava o projecto de Newton de quantificação dos fenómenos químicos a partir da «investigação diligente das causas e propriedades» das forças de curta distância entre as partículas constituintes dos corpos, numa afirmação da Química como um ramo da Física e na prossecução de um programa geral de explicar todos os fenómenos da natureza, dos fenómenos celestes aos fenómenos químicos, em termos das forças actuantes entre os corpos.

Sem ignorar a importância do tratamento quantitativo decorrente do programa newtoniano, o paradigma do atomismo de Dalton orientaria o tratamento quantitativo dos fenómenos químicos, primordialmente, para o estabelecimento das regras de combinação química a partir do reconhecimento da importância fundamental dos *pesos* relativos dos diversos tipos de átomos. Este tratamento foi bem sucedido. Nele a Química afirmou-se, no seu desenvolvimento histórico subsequente, cada vez mais, como disciplina verdadeiramente científica, autónoma e independente da Física. Todavia, de modo algum, esse desenvolvimento factual pode ser tomado como prova da não-viabilidade histórica do projecto de Newton.

NOTAS

- (1) — a) — Isaac Newton, *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, Londres, 1867, Apud Josephi Streater, Typ., 1.ª edição; b) — Idem, *Cantabrigiae*, 1713, 2.ª edição; ec) — Idem, Londres, 1726, Apud Guil. & Hoh. Innys Typ., 3.ª edição.
- (2) — F.S. Taylor, *An Alchemical work of Sir Isaac Newton*, Ambix, vol. V (1956), pp. 59 ss; R.J. Forbes, *Was Newton an Alchemist?*, Chymia, vol. 2 (1949), pp. 27 ss.
- (3) — *Unpublished Scientific Papers of Isaac Newton* (Ed. A.R. Hall and M.B. Hall, Cambridge Univ. Press, Londres, 1962).
- (4) — *Isaac Newton's Papers and Letters on Natural Philosophy* (Ed. I.B. Cohen and R.E. Schofield, Harvard Univ. Press, Cambridge, Mass., 1958).
- (5) — Isaac Newton, *Opticks: or, Treatise of the Reflections, Refractions, Inflections and Colours of Light*, Londres, 1704. Este tratado foi reeditado, em vida do autor, em 1718 e em 1721. As transcrições usadas no presente trabalho referem-se à reedição de 1952 (Dover Publ. Inc., Nova Iorque).
- (6) — É vasta a bibliografia sobre o atomismo de Newton. Aqui deixamos alguns títulos: A.J. Snow, *Matter and Gravity in Newton's Physical Philosophy*, Londres, 1926; H. Guerlac, *Newton and Epicure*, Paris, Palais de la Découverte, 1963; R.H. Kargon, *Atomism in England from Hariot to Newton*, Oxford. Clarendon Press, 1966; A. Koyré, *Newtonian Studies*, Londres, Chapman & Hall, 1965; G.D. Goehring, *Isaac Newton's Theory of Matter*, J. Chem. Educ., vol. 53 (1976), pp. 423 ss.; W.J. Green, *Models and Metaphysics in the Chemical theories of Boyle and Newton*, J. Chem. Educ., vol. 55 (1978), pp. 434 ss.
- (7) — *Newton's Philosophy of Nature — Selections from his writings* (Ed. H.S. Thayer, Hafner Press, Nova Iorque, 1953).
- (8) — J. Freind, *Praelectiones Chymicae*, Londres, 1709.
- (9) — T.H. Levere, *Affinity and Matter*, Oxford, 1971.
- (10) — E.F. Geoffroy, *Mem. Acad. Roy. Sci.*, 1718, pp. 202-212.
- (11) — L.B. Guyton de Morveau, artigo *Affinité* in *Encyclopédie Méthodique*, Paris, 1786, pp. 535-613. Este artigo foi traduzido para português por Thomé Rodrigues Sobral, tendo sido editado em Coimbra, na Real Imprensa da Universidade, com um prefácio do tradutor, em 1793, sob o título *Tractado das Afinidades Chímicas*.
- (12) — J. Dalton, *New System of Chemical Philosophy*, Manchester, 1808-1810, vol. I, Part. I, pp. 211-220.

Correspondência

Após a publicação, no número de Dezembro passado, de um texto «Em memória do Professor Samuel Martin Nelson», recebi do Professor João Oliveira Cabral a carta que a seguir se transcreve:

Prezado Colega,

Em 11 de Novembro p. p. enviei-lhe, em carta registada com aviso de recepção, um texto assinado por mim, para publicação no Boletim, intitulado «Em memória do Professor Samuel Martin Nelson». Nessa mesma data, em correio separado, enviei, sob registo, uma gravura com a fotografia do Professor Nelson.

Ao ler o que veio publicado no último número do Boletim — n.º 22, série II, Dezembro 1986 — fiquei com uma sensação de surpresa e desagrado, pois o texto foi deturpado e truncado.

O texto foi deturpado, pois não é «um texto bibliográfico», é um texto do tipo «Em Memória de...», designação que o Boletim tem adoptado nestes casos. Como é de norma, inclui, necessariamente, dados biográficos, e assim o Boletim tem procedido (ver, por exemplo, os casos do Professor Herculano de Carvalho e do Professor Stig Sunner, Boletim de Janeiro de 1981). Surgir este texto numa secção de «Informações, actualidade» é pouco curial e é mais uma deturpação.

O texto foi truncado quando só se publicam «...alguns extractos...» o que resultou na supressão de 5 dos 13 parágrafos que tinha, incluindo os dois finais.

Na contracapa do Boletim lê-se «Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores...». Serão? Não acha que cortar partes de um texto e publicar os extractos num lugar impróprio careceria de autorização prévia do autor, que não foi pedida e, desde já lhe digo, não seria dada?

Sabendo, como é minha obrigação, das dificuldades financeiras da Sociedade, a minhas expensas mandei fazer a gravura da fotografia. Isto poupava despesas à Sociedade e não trazia qualquer acréscimo de custo de composição e impressão. O espaço ocupado pela gravura é, até, um pouco menor do que no caso do Professor Stig Sunner, texto que me serviu de modelo. Que sucedeu com essa gravura? Porque é que não foi publicada?

Não quero crer que tenha havido qualquer propósito no que se passou com o tratamento dado ao meu texto. Por isso, venho sugerir-lhe que, no próximo número do Boletim, o texto que enviei seja publicado na íntegra e com a correspondente reprodução da fotografia do Professor Nelson.

Agradeço, antecipadamente, me informe da sua decisão, tão rapidamente quanto possível.

Com os melhores cumprimentos,

Prof. João de Oliveira Cabral

Não houve de facto qualquer propósito «oculto» por parte da Direcção do Boletim no tratamento que foi dado ao texto referido. Em minha opinião não houve qualquer deturpação do texto e a sua inserção na rubrica «Informação, actualidade» corresponde a um critério que tem sido seguido em situações semelhantes pela actual Direcção — ver por exemplo notícias relativas ao desaparecimento de cientistas como Paul Dirac (n.º 19) e Paul Flory (n.º 22). O facto de o Professor Nelson ter tido relações estreitas com químicos portugueses está bem sublinhado no conteúdo e na extensão do texto publicado. Dado que não se tratava de um «artigo», o texto referido não foi enviado para revisores mas antes tratado da forma que a Redacção entendeu mais conveniente.

Apesar de não concordar com o essencial do conteúdo da carta atrás publicada, e apesar de considerar que a publicação do texto integral pouco trará de novo aos leitores do Boletim, optei pela sua publicação na íntegra e pela sua ilustração com a fotografia do Professor Nelson, tal como o Professor João Cabral explicitamente sugere.

J.J.M.R.

Em memória do Professor Samuel Martin Nelson

No auge da sua produção científica, de qualidade ímpar, em 10 de Dezembro de 1985 faleceu, inesperadamente, o Professor Samuel Martin Nelson, da Queen's University of Belfast, uns seis meses depois de esta Universidade o ter distinguido com a atribuição de uma cátedra pessoal.

A terrível doença que o vitimou nunca o afectou intelectualmente, tendo cumprido com todas as suas obrigações até aos últimos momentos da vida e sem nunca se lhe ter ouvido um queixume. Mesmo quando, pouco meses antes de falecer, deixou de poder usar a mão direita, passou a escrever com a mão esquerda, revelando uma força de vontade e uma coragem muito pouco comuns.

Samuel Martin Nelson nasceu em Ballymena, Irlanda do Norte, a 15 de Março de 1928. Terminados os estudos secundários no Methodist College, ingressou na Queen's University of Belfast, onde terminou o curso de Química, em 1949. Aí, sob a orientação do Doutor R.C. Pink, prosseguiu estudos graduados em Química

de Colóides, que conduziram à obtenção do grau de Ph.D. (1953). Durante cerca de um ano (1954) ocupou o cargo de «assistant lecturer», naquela universidade, tendo realizado trabalhos respeitantes à extracção de tecnécio existente em resíduos de reactores nucleares. Em 1955, Martin Nelson foi para Oxford University, onde, sob a orientação do Doutor L.E. Sutton, efectuou trabalhos de investigação sobre relaxação dieléctrica, tendo obtido o grau de D.Phil. em 1958.

Após um período de dois anos, em que trabalhou na indústria, em 1960 foi convidado para o cargo de «lecturer» em Química Inorgânica na Queen's University of Belfast, convite que aceitou. Em 1961 foi promovido a «reader» em Química Inorgânica e, em 1985, foi finalmente feita justiça pela sua *alma mater* ao atribuir-lhe uma cátedra pessoal em Química Inorgânica. Antes disso, tinha sido convidado, em 1972, para Director do Departamento de Química e supervisor de Química Inorgânica na Bowling Green State University (Ohio, U.S.A.), convite que declinou por não querer

abandonar o seu país e a sua universidade. Também, desde 1974, era professor visitante da Auburn University (Alabama, U.S.A.).

A evolução científica do Professor Nelson apresenta aspectos bem curiosos. As suas dissertações de doutoramento eram de índole diferente e pouca ou nenhuma ligação tinham com Química Inorgânica. Após iniciar, em 1960, as funções de «lecturer» em Química Inorgânica, passou a dedicar-se, de alma e coração, a este ramo da Química, realizando trabalhos de investigação, particularmente no âmbito de compostos de coordenação, com que grangeou uma indiscutível reputação. Em 1965, foi-lhe concedida uma licença sabática de seis meses, tendo aproveitado esse tempo para, na Ohio State University, trabalhar com o Professor Daryle H. Busch. Começaram, assim, os seus notáveis trabalhos de investigação sobre complexos metálicos com ligandos macrocíclicos, incluindo a sua importância em Química Bioinorgânica, aspectos em que se tornou uma autoridade mundial.



Professor
Samuel Martin Nelson

As relações entre o Professor Nelson e a Faculdade de Ciências do Porto iniciaram-se em 1963/64, ano lectivo em que recebeu, no seu laboratório, um docente dessa Faculdade a quem tinha sido concedida uma bolsa para pós-doutoramento. Nessa data o Professor Nelson ainda só tinha publicado uns três ou quatro artigos sobre formação de complexos, com números de coordenação diferentes, entre um catião metálico e os mesmos ligandos. Inicialmente, o catião metálico era cobalto(II) e entre os ligandos figuravam, sempre, piridina e os seus derivados. Os trabalhos de investigação realizados em 1963/64 constituíram a parte experimental da dissertação daquele docente para concurso ao lugar de professor extraordinário, deram origem a um artigo independente dessa dissertação e, muito principalmente, foram o arranque da investigação em Química Inorgânica na Faculdade de Ciências do Porto, investigação dedicada a compostos de coordenação. A estas relações de natureza científica juntaram-se sólidas relações de amizade indefectível, o que não é menos importante a nível de relações humanas.

Dois ou três anos depois, uma assistente de Química da Faculdade de Ciências do Porto foi, como bolsista, para Belfast, onde, sob a orientação do Professor Nelson, obteve o grau de doutor (Ph.D.), a que, posteriormente, foi reconhecida equivalência ao doutoramento numa Universidade portuguesa.

A colaboração do Professor Nelson com o Porto passou por um período de um certo esmorecimento, sem nunca ter cessado por completo. Intensificou-se, porém, a partir de 1976, graças à concessão de uma

NATO Research Grant, tendo rapidamente atingido um desenvolvimento notável. Os resultados obtidos tiveram o seu quê de espectacular. Foi no decurso desses trabalhos que se conseguiram obter os primeiros complexos com ligandos macrocíclicos, do tipo diimina, com dois átomos de fósforo coordenadores. Ainda mais importante foi o ter-se mostrado que catiões alcalino-terrosos eram os mais eficazes para promover a condensação «2+2» de compostos heterocíclicos dicarbonílicos com diaminas primárias; dos complexos resultantes podiam-se obter muitos outros por transmetalização. Estes resultados tiveram um tal impacto na comunidade científica que o método passou a ser preferido por quem realiza investigação neste tipo de compostos.

Entre o termo dessa NATO Research Grant, em 1978, e o início de uma segunda, em 1981, que envolvia estudos electroquímicos totalmente realizados no Porto, a colaboração nunca perdeu intensidade. Mesmo após o termo, em 1983, desta segunda NATO Research Grant a colaboração só foi tristemente interrompida pelo falecimento do Professor Nelson.

O Professor Nelson era um grande amigo de Portugal, com particular apreço pelo Porto e a região a norte desta cidade. Desde que, nos fins dos anos sessenta, passou duas férias de verão numa praia minhota, nunca mais perdeu toda e qualquer oportunidade que se lhe oferecia para passar uns tempos no nosso País. A partir de 1976, veio a Portugal uma a duas vezes por ano, quer para realizar trabalhos de investigação, quer para participar activamente em júris de provas públicas, quer, ainda, para dar o seu contributo em reuniões científicas realizadas em Portugal. Neste último caso, é de mencionar que o Professor Nelson proferiu uma conferência plenária no «2.º Encontro Nacional de Química» (Porto, Janeiro de 1979), apresentou comunicações no NATO ASI «Metal Ions in Biology» (Tomar, Setembro de 1979) e proferiu uma palestra na «2nd International Conference on Bioinorganic Chemistry» (Algarve, Abril de 1985).

Que se tenham conhecimento, foram já prestadas duas homenagens à memória do Professor S. Martin Nelson. A Queen's University of Belfast, por intermédio do Presidente do Departamento de Química Pura e Aplicada, angariou fundos para instituir um prémio destinado a alunos de Química de curso cujo ensino estava a cargo do Professor Nelson. No «XI International Symposium on Macrocyclic Chemistry» (Florença, Setembro de 1986) realizou-se uma sessão especial, que lhe foi dedicada e em que foi realçada a vida e a obra do Professor Nelson, particularmente no campo de complexos com ligandos macrocíclicos, em que ele era uma autoridade mundial. Também já está planeada, para Novembro de 1987, a publicação de um número especial das Dalton Transactions, designado «Dalton Commemorative Issue for Martin Nelson and Tony Stephenson».

Seja esta a singela, mas sentida e sincera, homenagem prestada por químicos portugueses que tanto lhe devem, que tanto o admiravam, que tão honrados se sentiam com a sua amizade e a sua presença no Porto e outros locais do País, que para sempre guardarão a lembrança do Professor Nelson nas suas memórias, com uma grande tristeza e infinita saudade.

João de Oliveira Cabral

Laboratório Ferreira da Silva, Departamento de Química,
Faculdade de Ciências, 4000 Porto.

Congressos e conferências

1987

ABRIL

- 5-10**
Hawaii (USA) International Conference on Methods and Applications of Radioanalytical Chemistry
- 6-9**
Bilthoven (H) Euchem Conference on Mass Spectrometric of High Molecular Weight Compounds
- 6-9**
Neuherberg (RFA) 2nd International Symposium on Air Pollution and Plant Metabolism
- 6-10**
Karlsruhe (RFA) Eurocorr87
European Corrosion Meeting
- 6-10**
Lisboa (P) 2nd International Conference on the Basic and Applied Chemistry of f-Transition (Lanthanide and Actinide) and Related Elements
- 7-9**
Cambridge (G-B) Brownian Motion
- 8-9**
Karlsruhe (RFA) 1st European Corrosion Workshop on Impedance Measurements
- 13-15**
Roma (I) Biotech Ria 87
International Symposium on Biotechnology in Clinical Medicine
- 13-16**
Luzerna (Suíça) 9th European Conference on Surface Science — Ecos9
- 13-16**
Swansea (G-B) Annual Chemical Congress
- 19-25**
Rio de Janeiro (Brasil) 2.^{as} Jornadas de Engenharia dos Países de Língua Oficial Portuguesa
- 21-25**
Marianske Lazne (Checosl.) 11th Radiochemical Conference
- 26-29**
Bad Soden (RFA) IUPAC - Symposium on Characterization of Porous Solids
- 26-30**
Taormina (I) CEF 87: Utilization des Ordinateurs en Génie Chimique
- 26-30**
Limburg (N-L) Roldue Polymer Meeting-2
- 27-30**
Paris (F) Symposium International sur la Chimie du Bois et des Procédés de Mise em Pate
- 26-2**
Limassol (Chipre) 3rd Cyprus Conference on New Methods in Drug Research
- 26-2**
Buergenstock (Suíça) Euchem Conference on Stereochemistry

MAIO

- 1-?**
Ghent (B) 2nd International Symposium on Quantitative Luminescence Spectrometry in Bio-medical Sciences
- 4-7**
Balatonfuere (H) 8th Colloquium on Technical Application of Plastics and their Processing Technologies
- 6-6**
Salford (G-B) Symposium on Thiophene

10-15

Aussois (F)

Euchem Symposium
Unusual Methodologies in Organic Synthesis: Sonochemistry, Piezochemistry, High Temperature Chemistry**11-14**

Baden-Baden (RFA)

Anakon'87

11-14

Ghent (B)

IUPAC Conference;
2nd International Symposium on Quantitative Luminescence Spectrometry in Bio-medical Sciences**13-16**

Singapura (Ásia)

Instrument Asia 87
Chem Asia 87
Analab Asia 87**13-17**

Bruxelas (B)

Instrurama 87

14-15

Frankfurt (RFA)

1987 Annual Meeting of Dechema

15-18

Gregynog (G-B)

Euchem Conference on the Chemistry and Biochemistry of the Amino Acids

17-22

Tóquio (J)

Chemrawn VI: World Conference on Advanced Materials for Innovations in Energy, Transportation and Communications

17-22

Santa Margherita Ligure (I)

IUPAC International Symposium on Free-Radical Polymerization: Kinetics and Mechanisms

19-21

Riva del Garda (I)

8th International Symposium on Capillary Chromatography

21-23

Lisboa (P)

2.^{as} Jornadas de Plantas Aromáticas e Óleos Essenciais**22-26**

Seoul (Coreia)

Inpoco/Emetex 87

29-31

Tóquio (J)

IUPAC 88 Kyoto

31-31

Perugia (I)

Euchem Conference on Diels-Alder Reaction

31-1

Gotland (S)

Euchem Conference on Electron Transfer Reactions in Organic Chemistry

31-4

Leeuwenhorst (H)

Chemical Structures: the International Language of Chemistry

JUNHO**1-?**

Perugia ou Assis (I)

Euchem Conference on Microaggregates in Homogeneous Solution: Structure and Reactivity

1-4

Leon (N)

Euro Food Chem IV

1-6

Antibes (F)

Cip 87 et 4e Symp. Intern. sur la Gravure Seche et le Dépôt Plasma en Microelectronique

7-12

St. Louis (USA)

8th International Symposium on Organosilicon Chemistry

8-12

Assisi (I)

Euchem Conference on Microaggregates in Homogeneous Solution: Structure and Reactivity

- 14-19**
Amsterdan (H) 4th European Congress on Biotechnology
- 21-26**
Toronto (C) 25th Colloquium Spectroscopium Internationale
- 22-26**
Bechyne (Checosl.) 6th International Conference Boron Chemistry
- 23-29**
Peking (China) Emetex 87
- 28-3**
Haia (H) 13rd International Congress of Clinical Chemistry, VII European Congress of Clinical Chemistry
- 29-3**
Seoul (Coreia) Asian Chemical Congress 87 Seoul (Aschem Seoul) — Challenge in Chemistry for Asian Development
- 29-3/7**
Seoul (Coreia) Asian Chemical Congress 87
- 30-4**
Merseburg (RDA) 31st IUPAC Macromolecular Symposium
- JULHO**
- 6-9**
Praga (Checosl.) 30th Symposium on Macromolecules Polymer Supported Organic Reagents and Catalysts
- 6-10**
Noordwijkerout (H) 3rd International Conference on Bioinorganic Chemistry
- 6-10**
Canterbury (G-B) 8th International Meeting on NMR Spectroscopy
- 6-10**
Paris (P) International Symposium on Organic Reactivity
- 7-10**
Roma (I) World Conference on Chemical Accidents
- 7-10**
Manchester (G-B) Hydrometallurgy 87
- 12-17**
Sheffield (G-B) 3rd International Conference on the Chemistry of the Platinum Group Metals
- 13-16**
Praga (Checosl.) 10th Discussion Conference Small-Angle Scattering and Related Methods
- 13-17**
Darmstadt (RFA) Eurocarb IV — Th European Symp. on Carbohydrates Chemistry, Biochemistry, Technology
- 13-17**
Edingurgh (G-B) 11th International Symposium on Molecular Beams
- 13-18**
Sofia (Bulgária) IUPAC 87
31st International Congress of Pure and Applied Chemistry
- 19-24**
Kobe (J) Intern. Conf. on Heterodatome Chemistry (Ihac 87)
- 20-23**
Hiroshima (J) 12th International Symposium on Macrocyclic Chemistry
- 21-23**
Cambridge (G-B) 10th International Symposium on Synthesis in Organic Chemistry
- 21-26**
Pequim (China) 25th International Conference on Coordination Chemistry
- 26-30**
Vancouver (Canadá) 4th International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (Omcos IV)
- 26-31**
São Paulo (Brasil) 9th International Conference on Chemical Education — IX ICCE
- 26-31**
Nanjing (China) 25th International Conference on Coordination Chemistry
- 27-30**
Heidelberg (RFA) 5th International Topical Meeting on Photoacoustic and Photothermal Phenomena
- AGOSTO**
- 9-14**
Budapeste (Hungria) 13th International Conference on Photochemistry
- 9-14**
Regensburg (RFA) 8th International Symposium on Solute-Solute-Solvent Interactions (8th ISSSSI)
- 10-14**
Munique (RFA) 8th International Symposium on Cationic Polymerization and Related Processes
- 12-19**
Budapeste (Hungria) World Congress of Theoretical Organic Chemists
- 16-19**
Queensland (Austrália) Australia-USA Workshop on Radiation Effects on Polymeric Materials
- 16-21**
Heidelberg (RFA) 11th International Congress of Heterocyclic Chemistry
- 17-20**
Munique (RFA) Intramolecular Processes
- 17-21**
Odense (D) 2nd Nordic Symposium on Trace Elements in Human Health and Disease
- 23-28**
Sydney (Austrália) International Symposium on Copolymerization
- 23-28**
Emmetten (Suíça) Comet X — 10th International Conference on Molecular Energy Transfer
- 23-28**
Bratislava (Checosl.) 9th Symposium on the Chemistry of Heterocyclic Compounds
- 24-27**
Veszprem (H) 2nd Erdey-Gruz Symposium on the Structure of Liquids and Solutions
- 24-28**
Viena (Áustria) 6th International Conference on Fourier Transform Spectroscopy
- 24-28**
Munique (RFA) 8th International Symposium on Cationic Polymerization and Related Processes
- 25-30**
Pequim (China) 8th International Conference on Computers in Chemical Research and Education
- 30-4/9**
Praga (Checosl.) 9th International Congress of Chemical Engineering, Chemical Equipment Design and Automation — Chisa 87
- 30-4/9**
New Orleans (USA) 194th ACS National Meeting
- 31-4/9**
Tóquio (J) Ipsc/Tokyo 1987 — 8th International Symposium on Plasma Chemistry
- SETEMBRO**
- ?
Todelo (E) 7th Fechem Conference on Organometallic Chemistry
- ?
Goteborg (S) Eucem Conference on Chemical Methods of Sea-Water Analysis
- 6-11**
Håmburgo (RFA) 3rd International Congress on Hormones and Cancer
- 6-11**
Garmisch-Partenkirchen (RFA) 6th International Conference on Solid State Ionics
- 7-9**
Edinburgh (G-B) Symposium of Synthesis and Biosynthesis of Natural Products
- 7-11**
Paris (F) Euroanalysis VI
European Conference on Analytical Chemistry
- 7-11**
Paris (F) Chemical Reactivity in Liquids: Fundamental Aspects (42nd Int. Meeting on Physical Chemistry)
- 7-11**
França Eucem Conference on Semiochemicals in Plant and Animal Kingdoms
- 8-11**
Guildford (G-B) 7th International Bioanalytical Forum: Bioanalysis of Drugs and Metabolites, Especially Anti-Inflammatory and Cardiovascular
- 10-11**
Interlaken (Suíça) 9th International Macromolecular Symposium on Polymer Blends
- 10-16**
Polanica (P) 8th Workshop
Horizons in Hydrogen Bond Research
- 14-16**
Birmingham (G-B) Dynamics of Elementary Gas Phase Reactions
- 14-17**
Nieuwpoort (B) International Symposium on Innovation in Zeolite Materials Science
- 15-18**
New Orleans (USA) 6th International Conference on Heavy Metals in the Environment

- 15-18**
Annecy (F) 11th International Symposium on the Prevention of Occupation Accidents and Diseases in the Chemical Industry Theme: Safety in Handling Gases
- 17-18**
Londres (G-B) The Biological Methylation of Heavy Elements
- 21-25**
Massachusetts (USA) Chemrawn IV
Modern Chemistry and Chemical Technology Applied to the Ocean and its Resources
- 21-25**
Castle Beclyne
Checosl.) 10th Symp. on Industrial Crystallization
- 22-24**
Hannover (RFA) Biotechnica 87 Hannover, 3rd International Exhibition + Congress for Biotechnology
- 22-25**
Cordoba (E) 12.ª Reunión Bial de Química Orgânica
- 23-25**
Santiago de Compostela I Congresso Hispano-Português de Química Terapêutica (E)
- OUTUBRO**
- 7-9**
Frankfurt-Hoechst (RFA) Organiche Elektrochemie
- 19-23**
Stuttgart (RFA) Ecasia 87
European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis
- 19-23**
Schloss Elmau (RFA) Euchem Conference
Biotechnology in Chemistry — Biocatalysis and Bioprocess Engineering
- NOVEMBRO**
- 8-13**
Barcelona (E) Expoquimica 87 — Equiplast 87 — Euro/Surfas 87
- DEZEMBRO**
- 15-16**
Reading (G-B) Faraday Symposium Molecular Vibrations
- 1988**
- JANEIRO**
- 7-30**
Cádiz (E) IV Seminário de Química Marina — Cádiz
- 4-8**
Bancoque (Tailândia) 1st Eurasia Conference on Chemistry of Solution
- FEVEREIRO**
- 1-3**
Baden-Baden (RFA) 2nd International Symposium on Preparative and Up Scale Liquid Chromatography
- MARÇO**
- 28-30**
Durham (G-B) Solvation
- MAIO**
- 24-27**
Paris (F) 2nd World Surfactants Congress
- 29-3/6**
Quioto (J) IUPAC 88 Kyoto
16th International Symposium on the Chemistry of Natural Products
- JUNHO**
- 5-11**
Frankfort (RFA) International Meeting of Chemical Engineering and Achema — Chemical Engineering Exhibition Congress
- 5-11**
Toronto (Canadá) 195th Acs National Meeting and 3rd Chemical Congress of North America
- 26-1/7**
Calgary (C) 9th Congress on Catalysis
- JULHO**
- 4-7**
Nancy (F) 7th IUPAC Conference on Organic Synthesis
- 11-15**
Brighton (G-B) 2nd International Conference on Nuclear and Radiochemistry
- 17-22**
Paris (F) 8th International Biotechnology Symposium
- AGOSTO**
- 1-6**
Quioto (J) 32nd International Symposium on Macromolecules
- 15-19**
Freiburg (RFA) 12th International Liquid Crystal Conference 1988
- 15-19**
Budapeste (Hungria) 10th International Symposium on Medicinal Chemistry
- 16-19**
Tóquio (J) 7th International Symposium on Mycotoxins and Phycotoxins
- 21-27**
Regensburg (RFA) 9th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry
- 29-2/9**
Praga (Checosl.) 10th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics
- SETEMBRO**
- 4-9**
Turin (I) 13th International Conference on Organometallic Chemistry
- 5-9**
Hamburgo (RFA) 13th International Symposium on Macrocyclic Chemistry
- 12-15**
Freiburg (RFA) 4th European Symposium on Inorganic Chemistry
- 18-23**
Viena (A) 17th International Symposium on Chromatography
- 30-30**
Italia Surface Properties of non Metallic Solids
- OUTUBRO**
- ?** International Symposium Computational Methods in Chemical Design: Molecular Modelling and Computer Graphics
- 10-12**
Cannes (F) International Scientific Meeting on Supercritical Fluids
- DEZEMBRO**
- ?** Euchem Conference Gas Phase Reactions
- 1989**
- JUNHO**
- 5-9**
Karlsruhe (RFA) 2nd International Conference on Analytical Chemistry in Nuclear Technology
- AGOSTO**
- 28-1/9**
Wiesbaden (RFA) 11th International Symposium on Microchemical Techniques
- 1990**
- JUNHO**
- ?** Helsinquia (F) 8th International Conference on Organic Synthesis
- JULHO**
- 1-1**
Tuebingen (RFA) International Conference on Synthetic Metals 90
- AGOSTO**
- ?** Viena (A) Euroanalysis VII
7th European Conference on Analytical Chemistry
- 5-10**
Hamburgo (RFA) 7th IUPAC Congress on Pesticide Chemistry

ANÚNCIO

A Assembleia Geral da Sociedade Portuguesa de Química reunida no dia 6 de Abril na cidade do Porto decidiu, dada a escassez dos membros presentes, convocar uma nova Assembleia Geral para o dia 23 de Novembro do corrente ano com a seguinte ordem de trabalhos:

- Informações
- Eleição do Secretário-Geral
- Eleição dos Secretários-Gerais Adjuntos
- Eleição do Tesoureiro
- Eleição do Conselho Fiscal
- Eleição da Mesa da Assembleia Geral

Até ao dia 24 de Setembro serão aceites listas para as eleições acima previstas. Seguidamente o Presidente informará todos os sócios do teor das listas apresentadas, as quais serão votadas no dia 23/11/87. Ao abrigo do artigo 37.º do Estatutos da S.P.Q., os sócios poderão votar por correspondência.

Porto, 8 de Abril de 1987.

O Presidente da Mesa da Assembleia Geral

Vitor M. M. Lobo

boletim

SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE
QUIMICA



O Boletim da Sociedade Portuguesa de Química é o melhor suporte para tomar contacto com os químicos e engenheiros químicos portugueses e com as instituições e firmas que os empregam

Para as suas inserções publicitárias escreva para a Sociedade Portuguesa de Química, Av. da República, 37, 4.º 1000 LISBOA, ou telefone para 57 26 16 ext 266 (Eng.ª Matilde Marques)

NORMAS PARA A PUBLICAÇÃO DE ORIGINAIS NO BOLETIM

1. Os originais devem ser enviados em 3 exemplares (dactilografados) em envelope dirigido ao director do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, Av. da República, 37, 4.º, 1000 LISBOA.
2. Os originais não devem exceder, na generalidade, 15 páginas dactilografadas a 2 espaços.
3. As gravuras, desenhos, esquemas e outras figuras que acompanhem os originais devem estar numeradas e acompanhadas das legendas correspondentes. A qualidade das ilustrações deve permitir uma boa reprodução. As fórmulas complexas devem ser preparadas como ilustrações.
4. Os artigos publicados são da exclusiva responsabilidade dos seus autores.
5. As regras de nomenclatura a utilizar devem ser exclusivamente as regras recomendadas pela IUPAC.
6. Compete à Direcção do Boletim a aceitação da publicação de qualquer original que lhe seja submetido. Em caso de dúvida sobre o interesse desta, o original será submetido a apreciação por, pelo menos, dois especialistas sócios da SPQ designados pela Direcção do Boletim.

PREÇO DA PUBLICIDADE POR NÚMERO DO «BOLETIM»

Página interior (só preto)

1/8 de página.....	5 000\$00
1/4 de página.....	7 000\$00
1/2 página.....	10 000\$00
1 página.....	15 000\$00

Capa 3 (a duas cores)

1/8 de página.....	7 000\$00
1/4 de página.....	10 000\$00
1/2 página.....	15 000\$00
1 página.....	25 000\$00

Capa 4 (a duas cores)	35 000\$00
-----------------------------	------------

