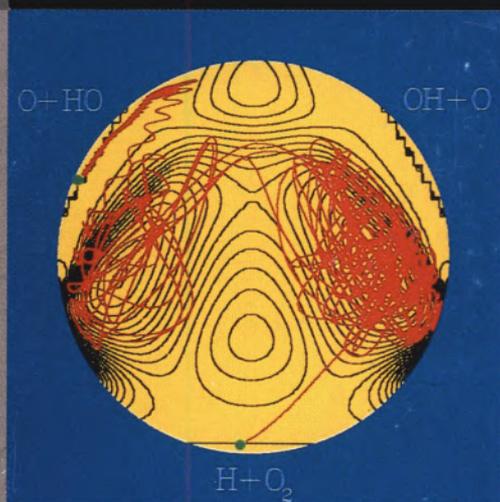


QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Superfícies de energia potencial

QUÍMICA TEÓRICA
& COMPUTACIONAL

Entrevista com António Varandas,
Prémio Ferreira da Silva 1991





Química, Boletim da Sociedade Portuguesa de Química
Propriedade da Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870-1180
Registo na DGCS n.º 101240 de 28/9/72
Depósito Legal n.º 51420/91
Publicação Trimestral
N.º 47 - Outubro 1992

Redacção e Administração

Avenida da República, 37 - 4.º 1000 Lisboa
Telefone (01) 793 46 37
Fax (01) 795 23 49

Director

Mário Nuno M. S. Berberan e Santos

Editor

Carlos Pessoa

Design Gráfico

Luis Moreira

Secretária de Redacção

Cristina Campos

Comissão Editorial

Jorge Calado (IST)
Alberto Romão Dias (IST)
Maria José Calhorda (IST)
Mariana Pereira (FCL)
Paulo Agostinho (ES Alto do Seixalinho)

Colaboradoras

José A. Martinho Simões (IST)
Joaquim Moura Ramos (IST)
Fernando Fernandes (FCL)
António Amorim da Costa (UC)

Publicidade

Hermínio Diogo (IST)

Execução Gráfica

FNAC Gráfica SA
Avenida dos Cavaleiros, Lote 1, Portela da Ajuda
1495 Lisboa
Telefone (01) 417 13 30 / 32 / 33
Fax (01) 417 13 34

Tiragem: 3800 exemplares

Preço avulso: 1 500\$00

Assinatura anual (quatro números)

5 000\$00 (Continente, Açores, Madeira e Macau);

6 000\$00 (Estrangeiro / Via aérea)

Distribuição gratuita aos sócios da SPQ

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

E D I T O R I A L

Regressa o Boletim da Sociedade Portuguesa de Química após uma interrupção de quase um ano. Com novo ímpeto, como é de exigir a uma nova equipa. E com nome próprio: "Química".

Mas também com uma inovação substancial, pois ao amadorismo – na sua acepção etimológica – que tem sido e continuará a ser o esteio do Boletim, vem agora juntar-se uma componente profissional. Torna-se assim possível uma outra apresentação, e também um modo de funcionamento novo, quer internamente, quer nas interacções com o exterior. E, mais importante ainda, passa a haver uma concentração de atenções no essencial do Boletim, e que é o seu conteúdo. Com efeito, assegurar a publicação regular do Boletim da SPQ, bem como uma legibilidade aceitável do mesmo, são metas obrigatórias mas insuficientes.

Procuraremos que o conteúdo possa ser uma boa amostragem da Química actual, e em especial da Química em Portugal, em todas as suas vertentes: investigação, ensino, indústria. Mas não tentaremos duplicar revistas já existentes, nem aceitaremos ser repositório de trabalhos desinteressantes. Acreditamos que o "Química" tem um amplo espaço próprio (vd. Orientação Editorial). Contamos com a contribuição de todos para o seu preenchimento.

MNBS

	1	notícias
	6	notícias SPQ
Medalhas de Ouro e Prémios Nobel	12	opinião
António Varandas, Prémio Ferreira da Silva	15	entrevista
Química Teórica & Computacional	22	artigos
Geocentrismo, Antropocentrismo e Heliocentrismo	30	
Psychro	40	software
O Carbono	43	moléculas
	46	novos produtos
	48	livros

TRANSFERÊNCIA "TRANSITÓRIA" DE FINANCIAMENTO PARA A JNICT. GOVERNO EXTINGUIU INIC

Foi publicado em Diário da República de 27 de Agosto último o decreto-lei n.º 188/92 que extingue o Instituto Nacional de Investigação Científica (INIC) e acomete à Junta Nacional de Investigação Científica e Tecnológica (JNICT) o financiamento dos 119 centros de investigação daquele Instituto através de um programa específico de contratos plurianuais com a duração de cinco anos.

A coordenação e o financiamento da investigação científica universitária cabia, até agora, ao INIC, cujo fim vinha sendo anunciado há vários meses, tendo ocorrido a sua transferência, para extinção, do Ministério da Educação para o do Planeamento e Administração do Território. Com a sua extinção, os centros serão integrados nas Universidades,

sendo posteriormente aberto um concurso para o respectivo financiamento, "tendo em vista a continuação do apoio às actividades de investigação científica e desenvolvimento experimental nos diversos domínios da ciência levados a cabo na universidade", segundo se pode ler num dos artigos do decreto-lei.

Esta transferência de competências para a JNICT é "a título transitório, até à efectiva criação dos organismos resultantes da reestruturação" das estruturas de investigação que dependem do Ministério do Planeamento e da Administração do Território.

Uma comissão criada pelo titular deste Ministério, Valente de Oliveira, e presidida por João Caraça (director do Instituto Gulbenkian de Ciência),

propôs a criação de um novo organismo, para o qual foi adiantada a designação de Instituto Nacional de Investigação Científica e Tecnológica (INICT), de uma agência de financiamento independente, de uma comissão de avaliação de políticas e programas e de um Conselho Nacional de Ciência e Tecnologia.

Esta proposta não vingou e, para já, tudo leva a crer que a JNICT ficará investida de um papel ainda mais reforçado, apesar de, em entrevista ao jornal PÚBLICO (15.7.92), o Secretário de Estado da Ciência e Tecnologia, Manuel Fernandes Thomaz, ter afirmado que estava fora de questão a criação de uma "super-JNICT".

Na mesma entrevista, Fernandes Thomaz revelou que a decisão sobre a futura es-

trutura da investigação científica em Portugal caberá ao Governo. Por agora, "terá de se organizar o apoio aos centros universitários através de um esquema de concurso", o primeiro dos quais – para contratos de investigação – será lançado em 1993, tendo apenas efeitos, obviamente, a partir de 1994. Para o próximo ano, concluiu o titular da Secretaria de Estado da Ciência e Tecnologia, "o que ficou combinado com a comissão executiva do INIC é que o financiamento será feito através da JNICT com base numa avaliação que está a ser finalizada pelos membros dos conselhos científicos do Instituto". Por ora, o que há de concreto é uma redução real e muito significativa das verbas atribuídas aos centros.

RELATÓRIO DA OCDE AVALIA POLÍTICA CIENTÍFICA PORTUGUESA

Um relatório da OCDE em que se procede à avaliação das políticas científica e tecnológica portuguesas foi apresentado publicamente no início do passado mês de Julho.

As suas principais conclusões podem ser sintetizadas em três pontos: a investigação está em melhor estado de "saúde" do que há dez anos atrás, quando um diagnóstico semelhante foi realizado pela mesma organização internacional, mas a ausência de uma política nacional de ciência e tecnologia clara e a enorme fraqueza da investigação aplicada colocam o nosso país a uma distância apreciável dos restantes países europeus.

A equipa, constituída por George Bugliarello, Raymond Maurel e Roy Rothwell, sublinha o papel muito discreto

da Secretaria de Estado da Ciência e Tecnologia e a vantagem de colocar a coordenação da investigação e desenvolvimento (I&D) sob a autoridade de um Ministério, tal como sucede em outros países, que possuem uma clara estratégia nacional para o sector que não parece existir em Portugal.

O relatório da OCDE critica também a inexistência de um orçamento de C&T digno desse nome, considerando o documento que existe no nosso país como "um simples exercício de contabilidade efectuada a posteriori". A reforçar esta ideia está o facto de a Assembleia da República nem sequer participar, através da sub-Comissão Parlamentar de Investigação Científica e Tecnológica, na discussão do

Orçamento de Ciência e Tecnologia.

Na avaliação dos pontos positivos do panorama português, os autores do relatório de avaliação realçam a qualidade de muitas das instituições de investigação, nomeadamente algumas universidades e instituições privadas sem fins lucrativos. Outros pontos fortes consistem no dinamismo de alguns quadros e instituições, a circunstância de não se verificar fuga de cérebros para países mais desenvolvidos, a boa qualidade de algumas infra-estruturas e o aumento significativo do financiamento da investigação.

Colocando nos pratos da balança os aspectos positivos e negativos da situação da Ciência e Tecnologia em Portu-

gal, o relatório não se revela muito optimista: é vincada a falta de financiamento para as despesas correntes de muitos laboratórios, a débil qualidade da avaliação realizada pelas instituições científicas e, sobretudo, a praticamente inexistente investigação aplicada, assim como a ausência de investigação nas empresas.

Na perspectiva de uma conhecida diminuição dos subsídios provenientes dos fundos comunitários, a redução dos investimentos nacionais é considerada uma das principais ameaças ao sistema científico português, que precisará de continuar a assegurar níveis de financiamento através do Orçamento de Estado para não perder definitivamente o contacto com os restantes parceiros europeus.

DIVULGAÇÃO DA RADIAÇÃO DE SINCROTRÃO

É hoje bem conhecido e aceite que a radiação de sincrotrão teve um enorme impacto em áreas das Ciências da Natureza como a Medicina, Biologia, Bio-química e Biofísica e também em Química, Química-Física, Ciências dos Materiais, Física Atómica, Molecular e do Estado Sólido, Catálise, etc.

A radiação de sincrotrão é radiação electromagnética emitida por partículas carregadas, electrões ou positrões, acelerados a velocidades próximas da luz. É produzida em anéis aceleradores com diâmetros que variam desde 30m a cerca de 300m e onde a energia a que as partículas são aceleradas varia de 600MeV a 6GeV, respectivamente, obtendo-se nestas últimas radiação emitida de menores comprimentos de onda que nas primeiras.

Nas últimas décadas, cientistas de todo o mundo desenvolveram técnicas experimentais baseadas na radiação produzida em sincrotrões, aproveitando as suas características únicas:

– Um espectro contínuo e muito intenso, desde o infravermelho até à zona dos raios X.

– Um alto grau de colimação; a divergência do feixe é tipicamente de 0.1 a 1mm por metro.

– Polarização linear da radiação no plano do acelerador e elíptica acima e abaixo desse plano.

– Brilho (fluxo emitido por unidade de área e de ângulo sólido) muito elevado.

– Radiação pulsada, permitindo medições em intervalos de 100 picosegundos.

Com radiação de sincrotrão é possível realizar estudos de Espectroscopia de raios X, como espectroscopia de absorção X, XAS, e com um considerável desenvolvimento devido às características específicas desta radiação, estudos de EXAFS, XANES, SEXAFS, REFLEXAFS. Assim, têm sido realizadas análises de novos materiais como vidros e materiais cerâmicos, minerais e materiais compostos, semicondutores e também supercondutores, estudos de coordenação de compostos metálicos não cristalinos, de caracterís-

ticas técnicas de superfícies, de filmes finos, etc.

No âmbito da Física Atómica e Molecular também a radiação de sincrotrão trouxe enormes vantagens, permitindo a análise de estruturas finas até então não possíveis de detectar em instrumentos laboratoriais.

A natureza pulsada da radiação de sincrotrão permitiu realizar estudos de topografia de raios X de processos periódicos que foram sincronizados com os impulsos na radiação incidente – uma técnica designada por estroboscopia; têm importantes aplicações em estudos de monocristais de materiais utilizados na indústria electrónica.

Experiências de Espectroscopia de fotoemissão, fluorescência e de fotoelectrão são usadas para analisar a estrutura electrónica de átomos, moléculas, sólidos e superfícies. As características especiais de polarização, intensidade, brilho e variabilidade de energia do feixe permitindo uma particular sensibilidade a superfícies tornam a radiação de sincrotrão especialmente vocacionada para este tipo de estudos.

A difracção de raios X é uma técnica muito usada e com aplicação de importância única na determinação das coordenadas dos átomos que existem em malhas unitárias, que por repetição a três dimensões formam cristais, ou seja em estudos estruturais. Para este tipo de determinações, a elevada intensidade e colimação do feixe da radiação de sincrotrão são de importância ímpar. Em particular, estudos estruturais de moléculas complexas com muitos átomos, como proteínas, enzimas e vírus só são possíveis, nalguns casos, com radiação de sincrotrão. Por outro lado foi também possível obter difracção de microcristais, estendendo assim a possibilidade deste tipo de estudos a compostos difíceis de cristalizar. A observação da difracção magnética de raios X em materiais magnéticos – que só as características da radiação de sincrotrão tornam possível – deve o seu impacto ao facto de permitir a observação de materiais altamente absorventes

para os neutrões e a separação das contribuições orbital e de spin para o momento magnético.

Uma das conquistas mais espectaculares da radiação de sincrotrão, é, no entanto, a utilização da natureza pulsada da radiação para efectuar estudos em tempo real. Aplicações envolvem o método de tempo de voo (time of flight) e também estudos de fluorescência resolvidos no tempo, sendo possível seguir reacções químicas, caracterizando intermediários instáveis e com tempo de vida muito curto. Estudos em tempo real em sólidos cristalinos ou em fibras, músculos ou outras amostras de interesse biológico, por exemplo, só são fiáveis na região dos raios X devido à natureza pulsada da radiação de sincrotrão.

Nesta altura, há na Europa, em funcionamento, dez instalações de radiação de sincrotrão – uma na Dinamarca, uma em França, três na Alemanha, uma em Itália, uma na Suíça, uma na Grã-Bretanha e duas na URSS, estando sete em fase de construção, uma em França (instalação Europeia), uma em Itália, duas na Holanda e três na ex-URSS.

Quatro das instalações em funcionamento pleno, Daresbury na Grã-Bretanha, BESSY e Hasylab na Alemanha e LURE na França, estão envolvidas num projecto subsidiado pela CEE, um projecto sobre grandes instalações – LSI. Este projecto tem como objectivos melhorar as condições instrumentais nas respectivas instalações, **promovendo e financiando integralmente o acesso de grupos de novos utilizadores**, sobretudo de países periféricos como Portugal. No nosso País o número de projectos, 10, e investigadores, 20, envolvendo radiação de sincrotrão é ainda extremamente reduzido, sobretudo quando comparado com Espanha, por exemplo, onde há já mais de 200 investigadores utilizadores desta radiação.

É finalidade deste artigo sensibilizar e despertar em mais investigadores portugueses o interesse e a formalização de projectos que possam ser submetidos aos directores das quatro referidas instala-

ções. A descrição acima dada não pretendeu ser exaustiva, mas apenas exemplificativa, de algumas das áreas e técnicas que usam com enorme vantagem a radiação de sincrotrão.

Há já, a nível nacional, uma comissão representativa dos utilizadores portugueses, constituída por:

Prof. Maria Teresa Ramos, Centro de Física Atómica da FC UL, Complexo II, Av. Gama Pinto, 2, 1699 Lisboa Codex. Telf. 01 - 795 07 90, Fax 01 - 796 56 22.

Prof. Luis Alte da Veiga, Departamento de Física da Universidade de Coimbra, 3000 Coimbra, Tel. 039 - 2 36 75.

Prof. Maria Arménia Carrondo, IST, Lisboa e CTQB, R. Da Quinta Grande, 6, 2780 Oeiras, Tel. 01 - 442 61 46, Fax 01 - 442 87 66.

A Prof. M. A. Carrondo é também a representante portuguesa numa Comissão nomeada pela DGXII das Comunidades Europeias para apreciação e acompanhamento do projecto LSI.

Os investigadores que pretendam obter informações sobre o acesso a este projecto deverão contactar um dos elementos desta comissão, ou então dirigir-se directamente aos directores das quatro instalações acima referidas:

Prof. R. Comes
Director LURE
LURE
Bâtiment 209 D
Université Paris-Sud
91405 ORSAY Cedex
FRANÇA

Prof. G. Materlik
Director DESY-HASYLAB
Notkestr. 85
D-2000 Hamburg 52
ALEMANHA

Prof. Dr. W. Gudat
Director BESSY
BESSY I
Lentzealle 100
D-1000 BERLIN 33
ALEMANHA

Prof. J. Bordas
Head SRS Daresbury
Science & Engineering
Research Council
Daresbury Laboratory
Warrington, Cheshire, WA4 4AD
REINO UNIDO

CONFERÊNCIAS DA EUCHEM

1993

Molecular aspects on carbohydrate-protein interactions

Lund - Suécia

Junho 1993

Organizador: Professor Göran Magnusson

Organic chemistry 2

Chemical center, Lund University, Box 124

221 00 Lund, Suécia

Processtechnique - Thermodynamics

Trondheim - Noruega

Agosto 1993

Organizador: Professor Bjørn-Hafskjold

Institute of Physical Chemistry Norwegian Technical High-school

N-7034 Trondheim, Noruega

Formation mechanisms for polyhalogenated Pollutants

Lycksele, Suécia

Agosto/Setembro 1993

Organizador: Professor Christoffer Rappe

Institute of environmental chemistry

University of Umeå

S-901 97 Umeå, Suécia

International symposium on free radicals

Nimjegen, Holanda

Agosto ou Setembro 1993

5th European Inorganic Chemistry

Holanda - Maio 1993

Presidente: Professor G. van Koten

Dept. of Metal-mediated Synthesis

University of Utrecht - Faculty of Chemistry

Padualaan, 8

3584 CH Utrecht

Holanda

6th International Symposium on Organic Free Radicals

Noordwijkerhout, Holanda

Perspectives of Modern Organometallic Chemistry: Basic Research and Industrial Application

Wildbath Kreuth, Alemanha

Fim de Setembro 1993

Organizador: Professor W. A. Herrmann

Anorganische Chemie Institut

TU München, Lichtenberstr. 4

D-8046 Garching

Alemanha

1994

Electron Microscopy in solid state Science

Suécia - Outono 1994

Organizador: Dr. J. O. Bovin

University of Lund

221 00 Lund, Suécia

Statistical mechanical Simulations in complex liquids

Suécia - 1994

Organizador: Dr. B. Jönsson

University of Lund

221 00 Lund, Suécia

Ultrafast processes in Chemistry and Biology

Suécia - 1994

Organizador: Professor V. Sundström

University of Umeå

901 87 Umeå, Suécia

SOCIEDADES DE QUÍMICA EUROPEIAS INSTITUEM O TÍTULO "EUROPEAN CHEMIST"

O European Communities Chemistry Council (ECCC) associa Sociedades de Química dos doze Estados da Comunidade Europeia, representando no seu conjunto mais de cento e cinquenta mil químicos.

A Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) tem vindo a acompanhar os trabalhos do Conselho e a participar nas suas iniciativas. De entre estas importa realçar a que conduziu à instituição da designação de "European Chemist" que se destina a qualificar, em termos europeus, o valor das

aptidões profissionais dos químicos. Esta decisão assume particular relevância no momento em que a nível da Comunidade Europeia se analisa a introdução de legislação comunitária definidora de quem deve ou não ser considerado determinado profissional.

O ECCC ciente de que aos químicos poderão vir a ser exigidas provas de qualificação para poderem intervir em determinadas áreas de actividade, tem defendido, junto da Comunidade Europeia, que deve competir às Sociedades de Química

superintender a atribuição dessa competência.

Na sua reunião de 2 de Abril passado o ECCC aprovou a criação de um júri, o "European Chemist Registration Board" (ECRB), o qual na sua primeira reunião, a 18 de Maio, aprovou com algumas emendas as propostas reguladoras da concessão do título.

A um "European Chemist" corresponderá uma qualificação académica associada com um período de experiência profissional, competindo ao ECRB e às sociedades nacionais

de química assegurar a sua atribuição a candidatos cujos currículos evidenciem um balanço apropriado entre formação académica e actividade profissional.

As primeiras candidaturas ao título de "European Chemist" devem ser apresentadas de forma a que uma decisão sobre elas seja tomada na reunião do ECRB prevista para o corrente 5 de Outubro. A entrega dos diplomas está prevista ser feita em cerimónia solene a realizar a 23 ou 30 de Novembro em Bruxelas.

"ITALIAN-PORTUGUESE-SPANISH MEETING IN INORGANIC CHEMISTRY (TOWARDS EUROPE)"

O segundo "Italian-Portuguese-Spanish Meeting in Inorganic Chemistry (Towards Europe)" realizou-se entre 23 e 27 de Março de 1992 no Hotel Alfa Mar, Algarve, Portugal, tendo participado cerca de trezentos investigadores italianos, portugueses e espanhóis, assim como alguns de outros países europeus.

As lições plenárias estiveram a cargo do Prof. L. Alcácer (IST, Portugal), Prof. E. Carmona (Univ. Sevilha, Espanha), Prof. I. Bertini (Florença, Itália) e do convidado especial, o Prof.

W. A. Herrmann (Munique, Alemanha).

Segundo o tema da conferência, a Química Inorgânica encarada num sentido lato, os assuntos principais escolhidos foram "Química Bioinorgânica", "Química Organometálica" e "Ciência de Materiais". Realizaram-se cinco ou seis mini-simpósios em cada um destes temas e ainda dois sobre "Química do Ambiente" e um sobre "Química na Preservação de Obras de Arte", atendendo ao particular interesse destes tópicos.

Cada mini-simpósio contou com a presença de um organizador e de cinco ou, nalguns casos, mais participantes que apresentaram comunicações orais (cerca de 25 minutos cada). Foram submetidas cerca de 120 comunicações em "poster" sobre os vários temas e houve ainda 22 lições orais convidadas de 30 minutos cada, sobre assuntos não directamente englobados nos mini-simpósios. As sessões foram vivas, com contribuição activa dos participantes.

Reuniram-se deste

modo químicos inorgânicos dos três países para discutir os assuntos de mais interesse e actualidade neste campo e partilhar a sua experiência científica, esperando-se que desta conferência resulte uma maior colaboração entre eles.

Existem ainda alguns livros de resumos disponíveis.

Maria José Calhorda
Centro de Tecnologia
Química e Biológica
e Instituto Superior
Técnico

O PROGRAMA DA IUPAC "QUÍMICA E AMBIENTE"

A necessidade de examinar cuidadosamente as relações existentes entre o Homem e o Ambiente deve ser uma preocupação primordial em todo o mundo e, por consequência, um assunto para a cooperação internacional.

Assim, algumas das organizações sediadas nas Nações Unidas, tais como o programa das Nações Unidas para o Ambiente (UNEP), Organização Mundial de Saúde (OMS), a Organização para a Alimentação e Agricultura (FAO), além de diversas organizações científicas têm vindo a dedicar uma atenção particular a estes problemas.

A comunidade internacional dos químicos não pode, de modo algum, ficar alheia aos problemas do ambiente, dada a relevância da Química em áreas como a indústria, a produção de energia, os transportes e a agricultura intensiva que têm grande impacto tanto sobre os ecossistemas como sobre o homem.

Existem ainda diversos domínios em que os químicos devem cooperar com outros cientistas a fim de poderem dar uma contribuição positiva para a protecção da vida neste planeta, no futuro. Entre

estes podem contar-se os seguintes:

i) desenvolvimento de produtos químicos não nocivos para o ambiente a partir de matérias primas diversas.

ii) redução dos actuais níveis de poluentes químicos na atmosfera, água e solos.

iii) estudo da transformação de substâncias químicas antropogénicas no ambiente.

iv) previsão do impacto de substâncias químicas nos ecossistemas, homem e clima.

O PROGRAMA

Para atingir estes objectivos a IUPAC decidiu na sua 35.^a Assembleia Geral que teve lugar em Agosto de 1989 em Lund, Suécia, concentrar uma parte importante dos seus esforços no desenvolvimento e aplicação de um programa em "Química e Ambiente".

A primeira acção deste programa consiste na preparação de um inventário dos projectos mais recentes e em curso da IUPAC relacionados com esta área que resultou na publicação (1), onde se referem áreas onde a IUPAC considera ser fundamental a cooperação com outras organizações inter-

nacionais envolvidas nesta problemática.

O segundo objectivo do programa é estimular o aparecimento de grupos de trabalho, comissões e sub comissões da IUPAC para iniciar e desenvolver novos projectos sobre a química e o ambiente.

O Prof. Valentim Kopytyng foi nomeado coordenador do programa que se divide em 6 temas gerais:

1) Procedimento analítico para a determinação de compostos químicos no ar, água, solos, organismos vivos e alimentos.

2) Medição de parâmetros físico-químicos relevantes para o ambiente.

3) Transferência e transformação de compostos químicos no ambiente.

4) Toxicologia de substâncias naturais e sintéticas.

5) Prevenção de poluição do ambiente.

6) Segurança na manipulação de substâncias químicas.

A publicação (1) refere detalhadamente os projectos da IUPAC actualmente em curso assim como a constituição das comissões, sub comissões e grupos de trabalho especializados.

ACTIVIDADES DA COMISSÃO

O objectivo da Comissão VI. 4 - Química atmosférica é a identificação de problemas relacionados com a atmosfera assim como emitir pareceres e cooperar nas actividades internacionais relacionadas com estes assuntos. A comissão trata de problemas relativos à qualidade do ar em locais de trabalho, atmosferas interiores, ambientes urbanos e regionais assim como na atmosfera global.

Entre outros assuntos, trata-se também da harmonização de procedimentos analíticos e de amostragem para o estudo da química atmosférica.

São os seguintes os projectos actualmente em curso:

1) Glossário de termos utilizados em química atmosférica (projecto 2/86).

2) Inventário de redes de amostragem da troposfera (projecto 1/86).

3) Avaliação e harmonização das actuais redes de amostragem da troposfera (projecto 3/86).

4) Revisão dos métodos analíticos para a medição de contaminantes nos locais de trabalho (projecto 4/87).

O QUE É A IUPAC

Formada em 1919, a International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) é uma associação não governamental e sem fins lucrativos, composta por organizações nacionais cuja adesão é voluntária.

São quatro os seus objectivos fundamentais:

- Promover uma cooperação permanente entre os químicos de todos os países membros;

- Estudar temas de importância internacional no âmbito das químicas pura e aplicada que necessitem de ser regulamentados, normalizados ou codificados;

- Cooperar com organizações internacionais con-

gêneres;

- Contribuir para o avanço da química pura e aplicada em todos os seus aspectos.

Para realizar estes objectivos a IUPAC promove um vasto conjunto de iniciativas, entre as quais merecem destaque o patrocínio de cerca de 30 conferências que se realizam anualmente em todo o mundo; o apoio activo nos campos da Educação Química, Materiais Avançados e Química e Ambiente; o desenvolvimento das ligações com uma rede de cerca de 30 organizações regionais e internacionais relacionadas com as aplicações no campo da química; a publicação de comunicações de conferências, com-

pêndios de nomenclaturas, símbolos e unidades; a edição da publicação científica "Pure and Applied Chemistry"; e a divulgação de informações relativas à actividade da IUPAC, seus membros, procedimentos de adesão, publicações, recomendações, conferências e outras iniciativas relevantes.

A IUPAC é composta actualmente por mais de 40 países membros, representados por uma organização nacional aderente, que no caso português é a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Cerca de 1500 cientistas de todo o mundo estão envolvidos nos trabalhos científicos da IUPAC numa base estritamente voluntária.

Em 1986, a organização lançou um ambicioso programa de recrutamento de modo a permitir uma mais ampla participação da comunidade dos químicos nos trabalhos da IUPAC.

Até à data, estão contabilizados mais de 7 000 filiados de 84 países, incluindo 600 químicos de países do Terceiro Mundo, muitos dos quais são apoiados financeiramente pela IUPAC.

Cada organização nacional que faça parte da IUPAC estabelece o montante da subscrição anual, uma parte da qual é enviada para a própria IUPAC. Esse valor foi fixado em 1992 pela SPQ em dois mil escudos.

5) Avaliação e recomendação das unidades a utilizar em química atmosférica (projecto 5/87) (3).

6) Compêndio de organizações e institutos e actividades actuais no campo da química atmosférica (projecto 76/8).

7) Inventarização das actuais preocupações e necessidades de identificação para a compreensão da química atmosférica (projecto 7/87).

8) Avaliação e compilação das constantes da lei de Henry relacionadas com a química atmosférica (projecto 8/87).

9) Artigos sobre problemas ambientais locais (projecto 12/87).

10) Organização de um "workshop" acerca da avaliação das incertezas nas concentrações previstas de CO₂ (projecto 13/87) - realizado em Julho de 1990, em Petten na Holanda (2).

11) Utilização de amostradores para a monitorização remota de ar ambiente (projecto 10/87).

12) Inventário global de emissões (projecto 9/87).

13) Educação em Química Atmosférica (projecto 11/87).

14) Inventário de valores - limite de emissão, ar ambiente e atmosferas dos locais de trabalho.

A Comissão considera que a actual carga de projectos em curso está perto do máximo pelo que, nas circunstâncias actuais é difícil encetar novos projectos.

Contudo, tem sido notada a necessidade de desenvolver projectos sobre a avaliação das concentrações de metano na atmosfera e sobre educação ambiental.

Referências:

(1) "Chemistry and the Environment - The IUPAC Programme - Recent and ongoing projects" - M. M. Freemantle (Ed.), IUPAC, Oxford, 1990.

(2) "Tentative conclusions of the workshop on the assessment of uncertainties in the projected concentrations of CO₂", IUPAC, 1990.

(3) P. Warneck, "Evaluation and Recommendation of Units for Use in Atmospheric Chemistry", 1990.

João F. P. Gomes
(Instituto de Soldadura e Qualidade)
Membro Associado da Comissão VI.4 da IUPAC

PRINCÍPIO DE CONSERVAÇÃO DA ENERGIA FAZ 150 ANOS

Foi em 1842 que o princípio de conservação de energia foi pela primeira vez enunciado de forma geral, em artigo publicado nos Anais de Química e Farmácia de Heidelberg (Ann. Chem. Pharm. 42 (1842) 233). O autor do artigo era Julius Robert Mayer, um jovem médico de 28 anos, que depois da formatura decidiu ver o mundo, exercendo num veleiro holandês que o levou de Roterdão a Batávia (hoje Jacarta) numa derrota de quatro meses. Conta-se que foram as observações da natureza colhidas durante a viagem que o induziram à formulação do princípio. Uma destas, particularmente sugestiva, foi a de o mar aquecer du-

rante as tempestades. A explicação do fenómeno, segundo Mayer, seria a transformação do trabalho realizado pelo vento sobre as vagas em calor, como consequência do entrecostar das massas de água desencontradas. Tal como a matéria, a energia não seria passível de criação ou destruição, mas apenas de transformação. Este princípio só no séc. XX veio a ser generalizado, com o estabelecimento da equivalência entre massa e energia por Einstein.

Segundo T. S. Kuhn, três outros cientistas chegaram independentemente ao mesmo enunciado geral do princípio, tendo também por base dados empíricos: Joule, Colding e

"Quando uma quantidade de energia de qualquer natureza desaparece numa transformação, então produz-se uma quantidade igual em grandeza de uma energia de outra natureza"

Helmholtz. Dos quatro, foi a Joule que os contemporâneos atribuíram a primazia, embora o seu trabalho sobre o "equivalente mecânico do calor" seja de 1843. A relativa obscuridade a que Mayer foi votado, parece ter influído no seu estado mental.

Em 1850, num acesso de loucura, tentou mesmo suicidar-se. E dois anos depois foi internado num hospício, onde chegou a estar acorrentado e a usar camisa de forças. Apenas em 1858 o seu trabalho começou a ser reconhecido, tendo em



J. R. Mayer

1867 recebeu um título nobiliárquico do soberano do seu país (o reino de Württemberg).

Nota: Para uma perspectiva histórica das leis da Termodinâmica, veja-se o artigo de A. M. F. Palavra e C. A. Nieto de Castro no Boletim SPQ (n.º 31, Março de 1988).

PROPRIEDADES DO FUTEBOLENO

A molécula de C₆₀, designada no *Chemical Abstracts* por *footballene*, futeboleno, dada a sua forma, tem sido objecto de intenso estudo, especialmente desde o desenvolvimento de um método de preparação de quantidades macroscópicas por Krätschmer e outros em 1990 [1]. Em 1991, foram publicados mais de duzentos artigos versando esta molécula. A sua estrutura foi caracterizada já por várias técnicas, incluindo espectrometria de massa, difracção de raios-X, absorção no visível, ultravioleta e infravermelho, Raman, RMN, RSE e HPLC. As propriedades dos estados electrónicos excitados do C₆₀ começaram também a ser estudadas, em particular por Arbogast e outros [2], Wang [3]

e Kim e outros [4]. A molécula parece não se decompor fotoquimicamente de forma importante em soluções de hidrocarbonetos. Apresenta uma absorção contínua no visível, de 620 nm até ao ultravioleta. O rendimento quântico de fluorescência (i.e., a probabilidade de um fóton absorvido dar origem à emissão de outro, sob a forma de fluorescência) é da ordem de 10⁻⁴, à temperatura ambiente e a 77 K, mas dependente do comprimento de onda de excitação. A fosforescência é também muito ténue. O tempo de vida de fluorescência medido em tolueno à temperatura ambiente foi de 1.2 nanosegundos.

Também a entalpia de formação padrão do futeboleno, no estado cristalino e a 298.15 K

foi determinada a partir da sua energia de combustão experimental, tendo-se obtido $\Delta_f H_m^\circ = -2422 \pm 14 \text{ kJ mol}^{-1}$ [5], o que traduz a menor coesão desta forma alotrópica em relação à grafite. Utilizando a entalpia de sublimação experimental do futeboleno, foi também estimada a entalpia de formação padrão na fase gasosa, $2656 \pm 25 \text{ kJ mol}^{-1}$. Este valor foi comparado com vários outros, teóricos, obtidos por métodos semi-empíricos de cálculo de orbitais moleculares (os valores teóricos variam entre 1197 e 4072 kJ mol⁻¹). Também a calorimetria diferencial de varimento foi utilizada recentemente para determinar o calor específico do futeboleno, de 120 a 560 K [6], não se tendo obtido evidência para uma fusão infe-

rior a 950 K.

[1] W. Krätschmer, L. O. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Nature*, **347** (1990) 354.

[2] J. W. Arbogast, A. P. Darmanyan, C. S. Foote, Y. Rubin, F. N. Diederich, M. M. Alvarez, S. J. Anz, R. L. Whetten, *J. Phys. Chem.*, **95** (1991) 11.

[3] Y. Wang, *J. Phys. Chem.*, **96** (1992) 764.

[4] D. Kim, M. Lee, Y. D. Suh, S. K. Kim, *J. Am. Chem. Soc.* **114** (1992) 4429.

[5] W. V. Steele, R. D. Chirico, N. K. Smith, W. E. Billups, P. R. Elmore, A. E. Wheeler, *J. Phys. Chem.*, **96** (1992) 4731.

[6] Y. Jin, J. Cheng, M. Varna-Nair, G. Liang, Y. Fu, B. Wunderlich, X. Xiang, R. Mostovoy, A. K. Zettl, *J. Phys. Chem.* **96** (1992) 5151.

JOSÉ AUGUSTO TEIXEIRA



Muitos sócios da Sociedade Portuguesa de Química recordarão o nome de José Augusto Teixeira, falecido em 4 de Junho de 1991. Uns lembrar-se-ão apenas do autor do nosso Compêndio de Química do 2.º ciclo e do Curso de Física do 3.º ciclo do liceu. Outros tiveram ainda o privilégio de terem sido seus alunos no Liceu de Camões, onde leccionou entre 1952 e 1966. Neste caso, vêm à memória as suas aulas bem preparadas, a clareza com que expunha as matérias, as observações oportunas sobre os nossos erros de entendimento, o interesse humano pelos seus alunos. E se a aula era à segunda-feira, ou após uma jornada europeia do Benfica, era certo um dito sobre o desempenho da equipa.

O doutor José Augusto Teixeira nasceu em 24 de Janeiro de 1914 em Gonçalo (Guarda), onde fez a instrução primária. Aluno distinto do Liceu da Guarda,

licenciou-se em Ciências Físico-Químicas pela Universidade de Coimbra em 1935, a que se seguiu o estágio e exame de estado no Liceu Normal Dom João III. Na sua "peregrinação" pelo país como professor dos liceus, passou por Chaves, Guarda, Funchal, Aveiro (onde, em 1951, "ressuscitou" a *Labor - Revista de Ensino Liceal*, da qual foi director até 1971) e, finalmente, Lisboa.

Durante os 14 anos como professor do Liceu de Camões, José Augusto Teixeira ainda pertenceu à Comissão Ministerial de Reapetrechamento para Escolas Superiores e Liceus (1960-1966), e lançou o Clube de Física e Química do Liceu de Camões, iniciativa então inédita em Portugal.

Da sua personalidade multifacetada sobressai uma certa inquietação intelectual, que o terá levado a tirar o Curso de Farmácia da Universidade de Lisboa (1957), a frequentar nos anos 60 o Curso de Engenharia Química do Instituto Superior Técnico (onde encontrou antigos alunos entre os professores e colegas) e a concorrer em 1965 ao lugar de professor do 2.º grupo (Física) da Escola Naval, funções que exerceu desde 1966 até se aposentar, em 1973.

Entre outras actividades a que se dedicou, é de recordar a sua parti-

cipação nos corpos gerentes da Sociedade Portuguesa de Química e Física, no Dicionário da Academia das Ciências de Lisboa e no Dicionário da Porto Editora.

Já aposentado, dedicou-se ao estudo de línguas e completou o Curso de Língua Italiana do Instituto Italiano. Uma faceta menos conhecida de José Augusto Teixeira foi o seu interesse pela prática poética e ensaística (ler texto em caixa).

Faleceu na sua casa de Lisboa em 4 de Junho de 1991, depois de prolongada doença que o imobilizou nos últimos anos da sua vida.

É com profunda saudade que endereçamos as nossas condolências — apesar do atraso com que é assinalado o funesto acontecimento — a seus filhos e viúva.

João Carlos Reis
(Faculdade de Ciências de Lisboa)



EVOCAÇÃO DE UM MESTRE

Se as suas aulas eram excelentes ou se os seus livros eram pedagogicamente os mais correctos, francamente, não me lembro. O que nunca esqueci foi o seu entusiasmo pela Química e o acompanhamento, frequentemente fora da sala de aula, que dava aos seus alunos, aconselhando-os, por exemplo, sobre os cursos que deveriam seguir. Se em 1958 vim para o IST seguir Engenharia Química, essa decisão deveu-se, em grande parte, à influência de José Augusto Teixeira.

E nesse ano comigo vieram, entre outros, Jorge Dias de Deus, Luís Brito Correia, Jorge Libermann Ribeiro e Rui Hasse Ferreira.

Em todos estes casos estou certo que a influência de José Augusto Teixeira também foi determinante.

Para com este professor — o que mais me marcou nos meus sete anos no Liceu Camões — tenho pois, para além de amizade, uma dívida de gratidão.

A. Romão Dias
Prof. Cat. do IST
Presidente da SPQ
(1989-92)

ENSAIO

Exercício não conseqüido de um matrimónio ciência-poesia... Mais fácil o exercício inverso, o do divórcio poesia-ciência. Escapando aos limites da objectividade vê aproximações onde a distância é patente. Descobrir **beleza** no conhecimento científico

já poderá melhor resultar. O que não deverá considerar-se estranho. Pois que, fora da poesia, em domínios próximos ou afastados, o belo está presente. Num óleo como numa gota de leite materno, numa escultura como numa fonte de água rumorejante, numa catedral como na calva ossatura rochosa de um cimo montanhoso, no discurso verbal

de "O Mostrengo" como no desenvolvimento de um teorema de geometria... Extrair beleza da ciência não apresentará obstáculos, beber nela o fluido poético é que já não é nada fácil. Só assim se explica que a poesia de motivação científica escasseie tanto. Na profusa poética portuguesa, que composições de motivação científica poderemos nós

alinhar? Para além da tentativa com certo interesse de Vitorino Nemésio em **Limite de Idade**, que mais? Um ou outro hausto muito restrito que poderá apontar-se aqui ou além, não atinge de modo algum dimensão que justifique um registo de poesia de raiz científica.

José A. Teixeira

NOVOS CORPOS GERENTES DA SPQ E PRESIDENTES DAS DELEGAÇÕES REGIONAIS

O Doutor Sebastião Formosinho Sanches Simões, Professor Catedrático da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra, e o Doutor José Dias Lopes da Silva, Professor Catedrático do Instituto Superior Técnico, são respectivamente os novos Presidente e Vice-Presidente da SPQ, após a Assembleia Geral de 20 de Junho passado, realizada em Lisboa.

Com a aprovação dos novos estatutos na Assembleia Geral realizada em Janeiro, foram criadas as seguintes Delegações: Aveiro, Braga, Coimbra, Lisboa e Porto. Durante o mês de Julho, com excepção das Delegações de Braga e de Coimbra, realizaram-se Assembleias Regionais para eleição dos respectivos Presidentes: Doutor Júlio Pedrosa de Jesus, Professor Catedrático da Uni-

versidade de Aveiro (Delegação de Aveiro), Doutor José Luís Figueiredo, Professor Catedrático da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto (Delegação do Porto) e Doutor Eurico Correia de Melo, Professor Auxiliar do Instituto Superior Técnico (Lisboa). As eleições para a Delegação de Braga terão lugar no dia 15 de Outubro.

Quanto a Coimbra, não

apareceu nenhum candidato na Assembleia de Julho. Com todas estas eleições completar-se-á a composição do Conselho Directivo da Sociedade. Tentará dar-se, em seguida, condições de funcionamento às Delegações de Aveiro e de Braga, bem como melhorar as de Coimbra, Lisboa e Porto (estas correspondentes às anteriormente denominadas Centro, Sul e Norte).

SEBASTIÃO JOSÉ FORMOSINHO

Tem 49 anos. Licenciou-se em Físico-Químicas pela Universidade de Coimbra em 1964 e doutorou-se em Química em 1971, na Royal Institution, em Londres. Foi contratado como assistente de Química pela Universidade de Coimbra em 1964 e, por concurso de provas públicas, foi sucessivamente nomeado professor extraordinário (1974) e professor catedrático

de Química (1979) da mesma Universidade. Os seus interesses de investigação situam-se nos domínios da fotoquímica, fotofísica molecular e reactividade química, tendo mais de cem publicações científicas nestes domínios. Publicou uma dezena de livros para o ensino superior e para o ensino secundário, sobre sociologia da ciência e sobre domínios científicos da sua

especialidade. Recebeu, em 1973, o prémio Artur Malheiros (Ciências Físicas e Químicas) da Academia de Ciências de Lisboa e, em 1984, a Medalha Ferreira da Silva (Química-Física) da Sociedade Portuguesa de Química. É membro do corpo editorial do Journal of Photochemistry e da Revista Portuguesa de Química. É sócio correspondente da Academia de Ciências de Lisboa e

da Sociedade Científica da Universidade Católica Portuguesa. Foi Secretário de Estado do Ensino Superior nos VI e VII Governos Constitucionais. Presentemente é Presidente da Comissão Instaladora do Pólo da Figueira da Foz da Universidade Católica Portuguesa e foi Vice-Presidente da Comissão de Ciências Exactas do Instituto Nacional de Investigação Científica.



JOSÉ DIAS LOPES DA SILVA

Tem 55 anos. Licenciado em Engenharia Química Industrial pelo Instituto Superior Técnico (1959); Docteur-ès-Sciences Physiques pela Université Louis Pasteur, Strasbourg (1969); Agregado em Química-Física pelo Instituto Superior Téc-

nico (1975). Professor Catedrático do IST. Vice-Reitor da Universidade Técnica de Lisboa e Presidente da Direcção do GAPTEC.

Tem-se interessado por: Estudo da natureza e evolução de excitações moleculares provocadas pela ra-

dição em meios orgânicos aromáticos; Análise da interacção de electrões de baixa energia com materiais orgânicos; Estudo da composição e da conformação molecular de superfícies de filmes finos, nomeadamente poliméricos; Estudo de exoelectrões emi-

tidos por materiais de electroafinidade negativa; Estudo de moléculas adsorvidas em superfícies de substratos metálicos; Desenvolvimento de técnicas espectroscópicas (XPS, EELS, IR) para a caracterização de superfícies e interfaces.



JÚLIO DOMINGOS PEDROSA DA LUZ DE JESUS

Tem 46 anos. Os seus graus académicos são os seguintes: Agregação em Química Inorgânica, Universidade de Aveiro, Janeiro de 1987; Ph. D. Química Inorgânica, University College Cardiff, Univ. Wales, 1978; Licenciatura em Ciências Físico-Químicas (1967) e Química-Ra-

mo Científico (1973), F. C. T. U. Coimbra. Professor Catedrático da Universidade de Aveiro. Foi Professor Associado, Professor Auxiliar e Assistente na Universidade de Aveiro, de Junho de 1974 a Maio de 1988; 2.º Assistente e Assistente na Faculdade de Ciências e Tecnologia da

Universidade de Coimbra, de Dezembro de 1967 a Junho de 1974. Desenvolve actividade no campo da Química de coordenação de metais de transição; química de materiais; química de polioxometalatos e da formação de sólidos inorgânicos. É Vice-Reitor e membro do Senado e da

Assembleia da Universidade de Aveiro; Coordenador, em Portugal do "European Network on Staff Development in Higher Education", da UNESCO; coordenador da Rede Nacional Universitária para a Formação e Desenvolvimento de Pessoal do Ensino Superior, no âmbito do CRUP.



JOSÉ LUÍS CABRAL DA CONCEIÇÃO FIGUEIREDO

Tem 47 anos. Professor Catedrático da Universidade do Porto, Faculdade de Engenharia, Departamento de Engenharia Química. Licenciado em Engenharia Químico-Industrial pela Facul-

dade de Engenharia da Universidade do Porto em 1968. Diplomado em Engenharia Química pelo Imperial College of Science and Technology (DIC) em 1975. Doutoramento pela Universidade de Londres

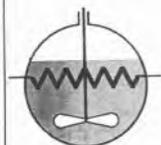
(Ph.D.) em 1975. Agregado pela Universidade do Porto, em 1980. É membro da Ordem dos Engenheiros, Sociedade Portuguesa de Química, Sociedade Ibero-Americana de Catálise, American Carbon

Society e sócio fundador da Sociedade Portuguesa de Materiais. Tem desenvolvido actividade de investigação no domínio da Catálise Heterogénea e dos Materiais Carbonados e Compósitos.



VI ENCONTRO LUSO-GALEGO DE QUÍMICA

VI ENCONTRO
LUSO-GALEGO
DE QUÍMICA



QUÍMICA
E
INDÚSTRIA

Subordinado ao tema genérico "Química e Indústria", vai realizar-se entre

26 e 28 de Novembro próximo, na Maia, o VI Encontro Luso-Galego de Química, uma iniciativa conjunta da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ, delegação do Norte) e da Associação Nacional de Químicos em Galiza (ANQUE).

Esta reunião é a continuação de uma série de encontros que têm vindo a ser realizados desde 1985, e que este ano inclui conferências plenárias, conferências convidadas, sessões de apresentação de comunicações orais e de painéis.

As áreas em que

será estruturado o Encontro são as seguintes: Processos e tecnologia; Investigação, desenvolvimento e inovação; Controlo de qualidade e de processos; Tratamento de efluentes e águas de processo; Catálise química de superfícies; Biotecnologia e química alimentar; Química fina e farmacêutica; e Química e tecnologia dos polímeros.

Existirá ainda uma exposição de instrumentos e equipamentos a decorrer paralelamente ao Encontro.

O custo da inscrição é de 10 mil escudos para

sócios da SPQ, ANQUE e Colégio Oficial de Químicos de Galiza de 5 mil escudos para estudantes não licenciados e de 15 mil escudos para os demais participantes, a efectuar até ao final do corrente mês de Outubro.

Para mais informações e esclarecimentos, os interessados deverão contactar o VI Encontro Luso-Galego de Química, Faculdade de Engenharia (a/c Prof. J. L. Figueiredo), 4099 Porto Codex, pelo telefone (02) 32 56 78 ou pelo fax (02) 31 92 80.

DIVISÃO DE EDUCAÇÃO DISCUTIU LINHAS DE TRABALHO

Uma das divisões da SPQ que, durante o 13.º Encontro Anual da SPQ, em Janeiro de 1992, discutiu linhas de trabalho a empreender nos próximos dois anos, foi a *Divisão de Educação*. Na sequência do que então se delineou constituíram-se várias comissões com tarefas específicas, cujo trabalho se relata a seguir de forma sucinta. Espera-se que quaisquer grupos que se organizem em delegações ou pólos da SPQ divulguem periodicamente no *Boletim* actividades realizadas ou em curso (para tal, contactar Paulo Agostinho).

O trabalho desenvolvido pelas comissões é apresentado e debatido periodicamente em reuniões abertas a quaisquer sócios que, mesmo não integrados em qualquer comissão, pretendam participar e dar a sua contribuição. A última reunião de trabalho teve lugar no dia 3 de Outubro e dela daremos notícia no próximo número.

Iniciativas das Comissões

- *Acções de Formação* - Esta Comissão pretende organizar Acções de Formação sobre temas es-

pecíficos e/ou pedagógicos de interesse para os professores de Química. A primeira destas Acções, a cargo de Manuela Silva, surge por sugestão de professores de Quimicotecnia. Versará Métodos Instrumentais de Análise e terá a orientação de vários docentes do IST. Decorrerá em 17, 24 e 31 de Outubro de 1992 na Escola Secundária Fonseca Benevides, em Lisboa, e poderá repetir-se noutras escolas e outros pontos do País.

- *Material de Baixo Custo* - O trabalho a que se dedica esta comissão tem por objectivo produzir material experimental e desenvolver experiências simples que possam ser realizadas pelos alunos na aula, incentivando-se, deste modo, a introdução de uma componente experimental nas aulas de Química. Grupos de professores das Escolas Secundárias de Alverca, Madeira Torres (Torres Vedras) e Santa Maria (Sintra), em colaboração com outros colegas, dedicam-se à produção de material de baixo custo para experiências a integrar numa unidade sobre a água. Na continuação, tem-se em vista produzir um

'kit' para o estudo da água a nível do 3.º ciclo de escolaridade, onde serão incluídas fichas de experiências e uma base de dados. Posteriormente poderão produzir-se 'kits' semelhantes para outros níveis de escolaridade destinados a outras unidades. A coordenação desta comissão está a cargo de Manuela Malhoa e Maria Elisa Maia.

- *Olimpíada de Química* - Esta Comissão propõe-se reiniciar o evento anual da Olimpíada de Química que visa estimular nos alunos o interesse pela Química, levando-os a apresentarem-se numa competição com base em provas de Química de índole criativa e interpretativa. Tendo-se sentido a necessidade de remodelar o modelo inicial deste evento, proposto há 10 anos e seguido desde então com poucas alterações, um grupo de professores da Escola Secundária Santa Maria, em Sintra, lançou as bases para a realização da Olimpíada de Química em moldes diferentes. Pretende dar-se a possibilidade de participação dos alunos em zonas do país nas vizinhanças da escola que frequentam, bem como

envolver mais alunos e professores nas selecções prévias e na final; prevê-se ainda a possibilidade de participação na Olimpíada Internacional de Química. O novo regulamento será distribuído pelas escolas no início do ano lectivo 1992-1993. As provas serão de tipo semelhante às realizadas em anos anteriores (tendo a SPQ editado em 1989 uma 'Colectânea de provas'). A coordenação desta comissão está a cargo de Manuela Malhoa.

- *International Newsletter on Chemical Education (INCE) - versão em português* - Após um lapso de dois anos em que se interrompeu a publicação da versão em português da INCE, um grupo de sócios decidiu retomá-la. Trata-se do veículo de comunicação do Comité do Ensino da Química da IUPAC, onde se divulgam actividades desenvolvidas a nível internacional ligadas a questões diversas de educação em Química. Em português foram publicados oito números, alguns dos quais temáticos - como os dedicados ao ensino da problemática CTS, Ciência-Tecnologia-Sociedade, à Química no ensino primário,

a computadores no ensino da Química - e uma monografia relativa a Segurança em Laboratórios Escolares, posteriormente divulgada nos PALOPs. Pretende agora editar-se os dois números que são publicados por ano e os que não foram editados desde 1990, para que a colecção em português não fique interrompida. A coordenação desta comissão está a cargo de Mariana Pereira.

- *Comité do Ensino da Química da IUPAC (CTC/IUPAC)* - Tem havido uma participação activa de Portugal no Comité do Ensino da Química da IUPAC. Em 1988, à reunião anual do CTC/IUPAC, que se realizou em Lisboa, foi acoplado, com o patrocínio da Unesco, um Simpósio internacional (de que a SPQ editou as 'Actas'). A representante actual da SPQ no CTC/IUPAC, Maria Elisa Maia, tem participado nas reuniões anuais do Comité e integra o projecto desenvolvido no âmbito IUPAC/Unesco do qual se produziram duas unidades - uma sobre Combustíveis Fósseis e outra sobre Água

- testadas em diversos países, entre os quais Portugal (e apresentadas no Encontro Anual da SPQ em 1992). Em Agosto de 1992, participou ainda na reunião do projecto internacional de Construção de Material de Baixo Custo coordenado por K. Sané, Presidente do CTC/IUPAC.

Notícia de Conferências

- *Conferências pelo Prof. J. Kotz* - O Prof. J. Kotz, da Un. de Nova Iorque em Oneonta e da equipa do *Chem. Matters*, na sua última estada em Portugal proferiu conferências em diversas universidades, divulgando actividades da American Chemical Society e software produzido pelo Projecto Seraphim. A SPQ decidiu adquirir algum do software que está à disposição dos sócios que o queiram utilizar na Sede.

- *ECRICE - European Conference on Research in Chemical Education* - No âmbito da FECS, Federação Europeia de Sociedades de Química, que a SPQ integra, decorreu em Montpellier em

Agosto de 1992 o 1.º Encontro Europeu sobre Investigação em Educação em Química. Pretendeu-se (1) divulgar e discutir metodologias e trabalhos de investigação em diferentes campos de Educação em Química, (2) desenvolver uma cooperação europeia em prol da área, (3) otimizar o ensino da Química. Vários Professores portugueses foram convidados a codinamizar diversos simpósios. Mariana Pereira integrou a Comissão Científica Internacional.

- *ESQLIOL - Ensino Superior de Química em Línguas Internacionais de Origem Latina* - Com periodicidade aproximadamente bi-anual organizam-se Colóquios que têm em vista impulsionar a divulgação e produção de trabalhos, em línguas latinas, sobre ensino de Química a nível do 12.º ano e ensino superior. Na sequência do 1.º Colóquio ESQLIOL realizado em Lisboa em Novembro de 1989 (e de que a SPQ editou as 'Actas'), decorreu em Málaga em Setembro de 1992 o 2.º Colóquio ESQLIOL. Participaram, com comunicação

convidada, vários professores portugueses ligados ao ensino superior. Maria Elisa Maia integrou a Comissão Organizadora Internacional.

- *12th International Conference on Chemical Education (ICCE)* - No âmbito das actividades do CTC/IUPAC realizam-se, com periodicidade bi-anual, conferências de Educação em Química, com programas que incluem a divulgação de actividades e tendências no ensino da Química, desde o primário ao universitário. Após a 11th ICCE, que decorreu em York (sobre a qual se apresentou uma breve notícia no *Boletim da SPQ* n.º 46, p. 50, e que será relatada numa das próximas *INCE* a publicar em português), realiza-se em Bangkok de 17 a 21 de Dezembro de 1992 a 12th ICCE. Informações: Dr. Somjai Wichaidit, The Chemical Society of Thailand, c/o Research Center, Ramathibodi, Ramathibodi Hospital, Rama VI Road, Bangkok 10400, Tailândia.

Mariana Pereira
Paulo Agostinho

PÓLOS

Ainda no seguimento dos novos Estatutos, onde se prevê a criação de Pólos da SPQ, informa-se que existem os seguintes (nos Departamentos de Química e/ou Engenharia Química): Instituto Superior Técnico (Responsável: Eng. Adelino Galvão), Universidade de Aveiro (Doutor Fernando de Jesus Domingues), Faculdade de Ciências de Lisboa (Doutora Helena Garcia), Faculdade de Ciências e Tecnologia de Coimbra (Doutor António Varandas), Faculdade de Farmácia do Porto (Doutora Madalena Magalhães Pinto), Faculdade de Engenharia do Porto (Doutor Manuel Ribeiro da Silva), Universidade de Évora (Dr. Paulo Fialho), Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (Eng. An-

tónio Dias), Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa (Doutor Luís Paulo Rebelo), Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro (Doutor José Féria Seita), Escola Superior Agrária de Santarém (Doutor Jorge Justino) e Faculdade de Farmácia de Lisboa (Dr. Judite Costa). Cada Pólo tentará dinamizar actividades no âmbito da Sociedade, para o que contará com o apoio da Delegação mais próxima, e terá à venda algumas das publicações da SPQ. Espera-se que, até ao fim de 1992, o número de Pólos aumente bastante. Se, na sua Escola, está interessado em criar um Pólo, contacte a Direcção Nacional da SPQ.

DIVISÕES

Durante o 13.º En-

contro Anual da SPQ, em Janeiro passado, realizaram-se reuniões das Divisões de Catálise, Educação, Química Analítica, Química Física, Química Inorgânica e Química Orgânica, e ainda dos Grupos de Química e Computadores e Espectrometria de Massa. Em todas elas foram planeadas actividades, das quais se irá dar notícia neste e nos próximos números do "Química" e/ou através de circulares.

DIVISÃO DE CATÁLISE

A Divisão de Catálise decidiu organizar reuniões científicas bianuais, intervalando com o Encontro (Geral) da SPQ (que, em princípio, passará a ter periodicidade bianual) e com o Simpósio Iberoamericano de Catálise. Decidiu-se também fazer um levan-

tamento, a nível nacional, de equipamentos, projectos, investigadores e interesses na área da Catálise. A coordenação da Divisão é feita pelo Doutor José Luís Figueiredo, da Faculdade de Engenharia do Porto.

DIVISÃO DE EDUCAÇÃO

Como foi anunciado através do Ministério da Educação (DREL), a SPQ decidiu promover acções de formação para docentes do Ensino Secundário, no âmbito da nova disciplina *Práticas Oficiais e Laboratoriais*. Estas acções serão iniciadas na área de Lisboa, ocuparão três sábados e consistirão em exposições breves sobre o fundamento de vários métodos instrumentais, incluindo polarimetria, refractometria, fotometria de chama, espectrofoto-

metria de UV-Vis, polarografia, coulometria e cromatografia, seguidas pela descrição de trabalhos práticos e pela realização experimental de alguns deles.

Mais informações sobre esta e outras futuras acções de formação para professores podem ser obtidas contactando a Doutora Elisa Maia (Faculdade de Ciências de Lisboa) ou a Dra. Manuela Silva (Escola Sec. Fonseca Benevides).

INSTITUTE FOR CHEMICAL EDUCATION

A SPQ adquiriu uma colecção completa de material distribuído pelo Institute for Chemical Education (EUA). Este material, que inclui várias publicações e mesmo pequeno equipamento, como um laser e alguns diapositivos para ilustrar a difracção da radiação, destina-se a ser examinado pelos interessados para eventual aquisição. Em alguns casos pode mesmo encarar-se o seu empréstimo aos sócios, para utilização nas escolas.

DIVISÃO DE QUÍMICA ANALÍTICA

Esta Divisão elegeu como Presidente a Doutora Maria de Lourdes Simões Gonçalves (IST), como Secretário-Geral o Doutor José Luís da Costa Lima (Faculdade de Farmácia do Porto) e como Vogal o Doutor Christopher Brett (Departamento de Química da Universidade de Coimbra). Decidiu-se fortalecer as relações com divisões e sociedades espanholas da área da Química Analítica, através da realização de actividades comuns (de que são exemplos, aliás, os Encontros Luso-Galegos de Química).

DIVISÃO DE QUÍMICA-FÍSICA

Esta Divisão decidiu

organizar Simpósios anuais, sendo o primeiro, em 1993 (Lisboa). A Comissão Organizadora será presidida pela Doutora Sílvia de Brito Costa (IST). Nessa altura serão eleitos os responsáveis pela Divisão. Encara-se também a possibilidade de criar um Grupo Especializado de Física Atómica e Molecular, provavelmente em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Física. Para mais informações contactar o Coordenador da Divisão, Doutor António Varandas (Departamento de Química, Universidade de Coimbra).

DIVISÃO DE QUÍMICA ORGÂNICA

Organizar-se-á um Encontro nesta área em 1993, onde também será discutido o modo de funcionamento da Divisão e serão eleitos os coordenadores. Até lá a coordenação ficará a cargo da Doutora Ana Lobo, da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa.

GRUPO DE ESPECTROMETRIA DE MASSA

Este Grupo decidiu organizar reuniões científicas com periodicidade bi-anual, sendo a primeira em 1993. Decidiu ainda iniciar um levantamento de equipamento e investigadores na área de Espectrometria de Massa, em Portugal.

GRUPO DE QUÍMICA E COMPUTADORES

A SPQ, através do seu *Grupo de Química e Computadores*, iniciou a aquisição de software educacional de Química, o qual será instalado na sede (e futuramente em todas as Delegações), para uso dos interessados.

Adquiriu-se, por exemplo, um conjunto de programas do *Chemical Education: Software*. Tal como tinha sido anunciado

anteriormente, o principal objectivo desta biblioteca de software é possibilitar aos sócios o exame de programas (comerciais ou não) e assim decidir sobre a sua aquisição. Por favor contacte os Coordenadores do Grupo (Doutor Fernando Fernandes, Faculdade de Ciências de Lisboa, ou Doutor José Féria Seita, Universidade de Trás-os-Montes) se desejar mais informações ou se tiver conhecimento de software não comercial que possa ter interesse geral. Existem outras iniciativas planeadas no âmbito do Grupo, a anunciar oportunamente. Uma delas, consiste no levantamento de software a nível nacional.

SEDE

A Comissão de Gestão da sede das Sociedades Portuguesas de Química, de Física, de Matemática e de Filosofia elaborou um regulamento sobre a utilização das instalações pelos sócios das quatro sociedades.

BIBLIOTECA DA SPQ

Foram oferecidos ou adquiriram-se recentemente vários livros de Química publicados em Portugal (a lista destes títulos passará a ser dada na rubrica *Livros* do "Química"). Espera-se que no final de 1992 venha já a haver um número de obras razoável para consulta. Uma vez mais, pede-se a colaboração de todos na detecção e na oferta de exemplares à SPQ (os textos escolares antigos são particularmente bem-vindos). Aos autores, solicita-se o envio de dois exemplares. Tentar-se-á que a revisão de algumas destas obras seja feita no *Química*.

Uma outra iniciativa independente das aquisições referidas será a criação de uma base de dados bibliográfica de obras de Química em Português.

EDITORIA DA SPQ

O Volume II da *Química e Sociedade* foi um sucesso editorial. Ainda pode comprá-lo (e ao Volume I) na Sede, em qualquer das Delegações ou nos Pólos da SPQ. Outro sucesso foi a edição da *Lista Abreviada de Grandezas, Unidades e Símbolos em Química-Física*, uma folha plastificada com a tradução em Português das normas da IUPAC. Também ainda a pode comprar, nos locais referidos. Infelizmente, a actividade editorial da SPQ foi muito menor que o desejável, por falta de condições financeiras. Espera-se que, durante 1993 a situação se modifique e se possa iniciar alguma da actividade planeada. Uma vez mais, pede-se aos autores de textos (docentes do Ensino Superior ou Secundário) que enviem dois exemplares ao Doutor Moura Ramos (IST), caso considerem a hipótese de a Sociedade editar os seus trabalhos.

REVISTA PORTUGUESA DE QUÍMICA

Por várias razões, a reformulação da *Revista Portuguesa de Química* (vd. *Boletim* de Setembro de 1991) foi adiada para o corrente ano. Os sócios que têm direito ao volume de 1987 (comemorativo dos 75 anos da SPQ) podem recebê-lo na Sede, ou pelo Correio (para o que devem enviar 500 escudos para a SPQ).

IUPAC

Recorda-se que a 37.^a Assembleia Geral da IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), se realizará em Lisboa, de 5-12 de Agosto de 1993. O Comité de Organização Local é constituído pelo Secretário-Geral da SPQ (Chairman) e pelos Doutores Carlos Nieto de Castro (Vice-

Chairman), Filomena Camões (Secretária), Raquel Gonçalves, Manuela Brotas de Carvalho, Elisa Maia, e ainda pelo Presidente do Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. A Assembleia Geral da IUPAC envolve cerca de 1000 participantes, de dezenas de países.

5TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THERMODYNAMICS OF NON-ELECTROLYTES

Realizou-se no Porto, de 28 de Junho a 2 de Julho, sob o patrocínio da SPQ, da Societé Chimique de France e da Real Sociedad Española de Física y Química. As áreas tratadas incluíram Sistemas Bioquímicos e Macromoleculares, Equilíbrio de Fases, Misturas de Não-Electrólitos, Termodinâmica de Superfícies, Extração Supercrítica, Calorimetria e Outras Técnicas Experimentais, Mecânica Estatística e Outros Métodos Teóricos e Termodinâmica Geral. Realizou-se, também, um Simpósio de Termoquímica.

VENDA DE NÚMEROS DO BOLETIM E DE MEDALHAS DA SPQ

Alguns números do *Boletim* encontram-se esgotados, mas ainda pode comprar muitos números antigos e completar a sua colecção. Os custos de cada exemplar são os seguintes (acrescidos dos portes de correio): até 1989, 200\$00 (300\$00 para não-sócios); desde 1990, 400\$00 (600\$00). Eis a lista dos números disponíveis:

I Série: 1 e 3

II Série: 1, 2, 3, 4, 7, 9, 10, 11, 12, 13/14, 15/16, 17/18, 19, 20, 21, 22, 23, 32/33, 34, 37, 38, 39, 40 e 42.

Quanto às medalhas comemorativas dos Encontros Anuais da SPQ, o seu custo unitário é de 1500\$00

(1800\$00 para não-sócios), com excepção da do 13.º, que é de 1800\$00 (2200\$00), também acrescido dos portes de correio. Pode ainda comprar as medalhas de todos os Encontros, excepto do 1.º, do 3.º e do 9.º.

As encomendas devem ser dirigidas à SPQ, acompanhadas de um cheque ou vale postal. Os portes de correio ser-lhe-ão debitados na altura em que receber a sua encomenda.

FICHEIRO DE SÓCIOS E QUOTAS

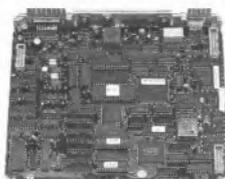
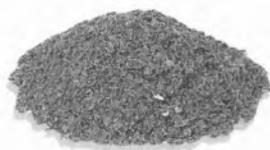
Nesta altura todos os sócios já devem ter recebido (e devolvido para a SPQ) uma ficha de inscrição/actualização de dados. Recordar-se que esta deveria ter sido enviada para a Sede da SPQ, juntamente com as quotas em atraso e a de 1992, se ainda não tivessem sido pagas.

O próximo Boletim (Janeiro de 1993) será remetido apenas aos sócios com a situação regularizada.

Tal como se disse no Boletim de Setembro de 1991, passará a ser enviada a cada sócio, no segundo semestre de cada ano, uma ficha de inscrição/actualização que deverá ser devolvida com o pagamento da quota do ano seguinte e com eventuais alterações (mudança de morada, de situação profissional, etc.).

FICHEIRO DE SÓCIOS E QUOTAS

Este será o último número o Boletim enviado para os sócios da SPQ que ainda não actualizaram o pagamento da quota. Se estiver nesta situação (o último ano em que pagou vem indicado no auto-colante com o seu endereço), por favor contacte a SPQ.



«GOSTARIAMOS DE CONHECER ALGO SEMELHANTE...»

O «SM2000» UM NOVO CONCEITO EM MOÍNHOS DE LÂMINAS PARA TRITURAÇÃO DE MATERIAIS ELÁSTICOS, MACIOS, FIBRAS, METÁLICOS, ETC., EM LABORATÓRIO E/OU OPERAÇÕES ANALÍTICAS NO CONTROLO INDUSTRIAL/INVESTIGAÇÃO. A SEGURANÇA DO «SM 2000» É TRADUZIDA PELO INIGUALÁVEL SISTEMA «CENTRAL INTERLOCK». ALIADO AO SEU MODERNO «DESIGN» ESTÁ TAMBÉM CONTEMPLADA A

SUA ERGONOMIA E A FÁCIL ASSISTÊNCIA TÉCNICA, REPRESENTANDO ASSIM O «SM 2000» A MAIS MODERNA TECNOLOGIA DE TRITURAÇÃO.

A PEDIDO ENVIAREMOS INFORMAÇÕES ADICIONAIS.



Retsch

SAMPLE PREPARATION AND ANALYSING TECHNOLOGY

EN EQUIPAMENTOS DE ANÁLISE E ENSAIO, LDA
RUA INFANTE D. HENRIQUE, 21 - 3º -
4000 PORTO
TELEF.: 2-322850/2-322713
FAX: 2-322713

Medalhas de Ouro e Prêmios Nobel

A. ROMÃO DIAS *

O insucesso dos atletas portugueses em conquistar medalhas nos recentes jogos olímpicos de Barcelona levantou grande celeuma e foi amplamente debatido com larga cobertura nos órgãos de comunicação social. Para além das algumas informações mais "fulanizadas" e, quiçá, menos elegantes, vários comentadores e responsáveis fizeram análises mais profundas, reconhecendo que os quatro anos de preparação intensiva entre edições dos jogos olímpicos são indispensáveis mas não chegam, remetendo o problema para a própria política dos clubes e, indo mesmo mais longe, para a pouca atenção dada ao desporto em todos os níveis do nosso sistema educativo.

Ressalvando todas as diferenças óbvias entre as estruturas e condicionalismos dos dois tipos de actividade, podemos talvez afirmar que a conquista de uma medalha de ouro nos jogos olímpicos tem, para um desportista, um significado semelhante à atribuição do prémio Nobel por parte de um cientista (e não só, mas são os cientistas que me interessam nesta nota). E aqui também, com a honrosa excepção ao Prof. Egas Moniz, encontramos um deserto de "medalhas de ouro". Acredito que as razões são, em parte, as mesmas e que têm a sua origem nas deficiências do nosso sistema educativo.

Muitas escolas, a todos os níveis de ensino, incluindo o universitário, ou não têm equipamentos gimno-desportivos ou têm-nos insuficientes e degradados. Em quantas escolas há programas desportivos coerentes para todos e em que os mais dotados são encorajados a desenvolverem as suas aptidões? Claro que no desporto existem os clubes para desenvolverem uma actividade alternativa. Mas nem todos vão para os clubes. Tudo começa na escola.

Voltemos, porém, ao ensino das ciências e da Química em particular. Quantas são as escolas do ensino secundário que têm laboratórios apetrechados de forma a que o ensino-aprendizagem não seja apenas livro-co e a que os alunos tenham acesso para ganharem uma percepção real da

Química, a ciência experimental por excelência? E quantas possuem equipamentos audiovisuais que permitam demonstrar experiências e outros aspectos que ultrapassam as capacidades dos laboratórios e que extravasam os próprios muros das escolas? É bom dizer-se que, mesmo a nível do ensino superior, muitas são as escolas que têm carências graves nos seus laboratórios, não só em termos de espaços como também em equipamentos que permitam um ensino-aprendizagem da Química moderna. E que dizer dos programas? São estimulantes e promovem a criatividade? Mostram a Química como uma ciência excitante e a mais importante em todos os aspectos da vida corrente?

Só assim se podem motivar os melhores alunos a escolherem um curso superior em Química ou com ela relacionado.

E quando a tudo isto somarmos as condições precárias em que tem vivido a investigação científica universitária, a falta de massa crítica, etc. é fácil perceber quão longe estamos de entrar na corrida para os prémios Nobel.

É evidentemente absurdo pensar que o ensino da Química se destina, apenas ou primordialmente, a fabricar potenciais candidatos ao prémio Nobel. Os licenciados em Química e áreas afins são cruciais para outras actividades das quais se destacam o desenvolvimento da indústria química, que emprega, a nível europeu, 8% do total do pessoal que trabalha na indústria. E é também em termos europeus que hoje devemos pensar.

Neste contexto é relevante citar um recente documento do CEFIC (European Chemical Industry Council) intitulado **EUROPEAN POLICY FOR SCIENCE AND TECHNOLOGY - The Position of the European Chemical Industry. Technological Innovation for Chemical Prosperity.**

«A Indústria Química Europeia foi fundada com base na investigação científica. Tradicionalmente investiu substanciais recursos humanos e de capital em investigação aplicada e desenvolvimento com vista a transfor-

mar conhecimentos novos em novos produtos.

Os graduados das universidades em ciência e tecnologia foram sempre um recurso humano vital. Assim, o excelente treino e a investigação básica de alta qualidade em química (e em outras ciências naturais e aplicadas) nas universidades e instituições académicas similares são pilares essenciais para o sucesso da Indústria Química Europeia. De igual importância é o ensino estimulante e formativo das ciências naturais ao nível das escolas secundárias. Só desta forma pode um número suficiente de jovens com talento desenvolver interesse suficiente para escolher a ciência como uma carreira para a vida. Também para a sociedade em geral uma compreensão básica da ciência e da química, em particular, dará uma melhor compreensão de uma disciplina que está no cerne de muitos aspectos de uma sociedade industrial e que é essencial para a compreensão de todos os processos da vida.

As nações europeias desenvolveram também uma variedade de instituições científicas para a investigação fundamental. A indústria química está firmemente convencida que a procura de conhecimento básico deveria continuar a ser uma das tarefas principais das instituições académicas onde é também necessária como uma parte essencial da educação nas ciências naturais.

Neste domínio da ciência pura é necessário que os cientistas possam exercer a maior liberdade possível de escolha na selecção da sua área de investigação. Historicamente esta auto-selecção com critérios rigorosos de qualidade impostos pelos pares tem resultado em grandes avanços no conhecimento científico. Avanços tecnológicos têm-se baseado frequentemente em resultados inesperados de tais origens.

Isto não deve excluir projectos conjuntos da investigação industrial e da investigação académica como meio de reforçar a compreensão mútua e o processo de inovação. Contudo, como regra, a investigação aplicada deve ser feita primordialmente na indústria.

ALTERAÇÃO DA NORMA!

Programas de financiamento para investigação conjunta com parceiros de vários países europeus são também importantes. Eles aceleram o processo de estabelecimento de uma comunidade científica europeia fortemente interligada que pode contribuir para o bem estar dos povos europeus como um todo.

A indústria química recomenda com insistência aos governos que dêem um maior apoio às instituições educacionais em ambas as suas tarefas de educadores e como pioneiras na investigação científica de ponta.

Isto requererá financiamento público das instituições académicas que:

- seja proporcionado às necessidades da indústria para mais cientistas e engenheiros num período de declínio demográfico;

- permita às instituições académicas conduzir investigação científica fundamental, com a possibilidade, mas não a necessidade, de realizar contratos de investigação com a indústria que sejam "comercialmente relevantes";

- encorajar e promover a mobilidade de cientistas e engenheiros qualificados através da Europa.

Isto requer uma forma de ensinar as ciências puras e aplicadas que:

- assegure um fornecimento adequado de professores bem treinados e entusiastas com bons conhecimentos sobre ciência e tecnologia e alertados para o papel vital da indústria em assegurar o bem estar e a prosperidade comuns:

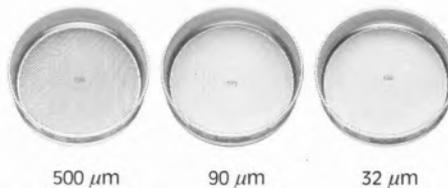
Isto requer curricula escolar que:

- dêem aos jovens uma educação imaginativa e estimulante em ciência e tecnologia que alimente a sua curiosidade e encorage a aprendizagem;

- permitam ao público em geral e especialmente aos futuros decisores, ganhar uma melhor compreensão da química e da tecnologia química e do papel da indústria química em fornecer soluções para problemas globais e assegurar a prosperidade comum.»

Ao ler este documento dos chefes da indústria química europeia e comparando-o com algumas das orientações presentemente predominantes no nosso país, fica-me a dúvida se Portugal será **de facto**, um país europeu. Se alguma vez iremos conquistar medalhas de ouro e prémios Nobel.

* Instituto Superior Técnico



A RETSCH ACABA DE INTRODUIZIR UM NOVO CONCEITO DE ANÁLISE GRANULOMÉTRICA.



RETSCH VIBROTRONIC

PRECISÃO ELEVADA . . .
MÁXIMA REPRODUTIBILIDADE

- MEDIÇÃO EXACTA DA INTENSIDADE DE VIBRAÇÃO
- CARGA INDEPENDENTE
- TOTAL CONTROLO ELECTRÓNICO DE TODOS PARÂMETROS DE OPERAÇÃO
- REGISTO DOS RESULTADOS
- SILÊNCIO QUASE TOTAL DURANTE OPERAÇÃO

Retsch

Sample Preparation Analysing Technology

EN EQUIPAMENTOS DE ANÁLISE E ENSAIO: LDA.
RUA INFANTE D. HENRIQUE, 21 · 3º · 4000 PORTO
TELEF.: 2-32 28 50, FAX: 2-32 27 13

INFORMAÇÃO DETALHADA AGUARDA O V / CONTACTO:

VIBROTRONIC

SM 2000

NOME: _____

SOCIEDADE: _____

ENDEREÇO SEDE: _____

Orientação Editorial

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

"Química" é um espaço aberto à publicação de entrevistas,

reportagens, artigos solicitados e textos propostos pelos interessados, noticiário, críticas de livros e correspondência dos leitores.

Nenhum texto será considerado a priori inaceitável, mas a Redacção dará preferência a artigos de carácter relativamente

geral e escritos de modo que possam interessar a um vasto leque de leitores. "Química" pretende ser um pólo dinamizador e publicação de referência para a abordagem das problemáticas relativas à situação nacional e internacional da Química.

Normas para a colaboração dos autores

1. Enviar três exemplares, dactilografados a dois espaços, com as páginas numeradas e em formato A4, endereçados ao Director do "Química", Boletim da SPQ, Avenida da República, 37 - 4.º, 1000 Lisboa. Não enviar os originais das eventuais ilustrações.

2. A Redacção acusará a recepção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores.

Com base nas apreciações obtidas, a Direcção do "Química" decidirá da aceitação ou recusa das colaborações propostas.

Eventualmente, proporá aos autores a reelaboração dos

textos antes de tomar uma decisão definitiva.

3. Os artigos devem conter um resumo de 50 a 100 palavras com a descrição do respectivo conteúdo. Salvo casos excepcionais, os textos não devem exceder 15 páginas A4.

Os autores deverão sugerir e apresentar ilustrações para os seus textos, até ao máximo de seis por artigo. As fórmulas complexas, os esquemas, etc. deverão ser preparados como ilustrações mas não estão incluídos no número limite anterior.

As ilustrações deverão ter a qualidade indispensável a uma

boa reprodução gráfica, devendo ser acompanhadas de legenda.

4. Os artigos devem seguir, tanto quanto possível, as recomendações da IUPAC quanto à nomenclatura e unidades.

5. No caso de os autores desejarem corrigir pessoalmente as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente no momento em que os enviem para a Redacção do "Química".

6. Os autores de artigos poderão, se assim o desejarem, encomendar separatas dos mesmos. A tabela de preços acompanhará a carta de aceitação.

ANTÓNIO VARANDAS, PRÉMIO FERREIRA DA SILVA

“Apoiar a investigação aplicada em detrimento da fundamental seria um erro crasso”

Portugal ainda não atingiu o excesso tecnológico, razão que leva A. J. C. Varandas, Professor do Departamento de Química da Universidade de Coimbra e galardoado com o prémio Ferreira da Silva pelo conjunto de uma actividade de investigação desenvolvida nos últimos anos, a afirmar a “Química” que o “nosso organismo científico” tem cuidado mais das “necessidades imediatistas”. Todavia, acrescenta, “a investigação fundamental deve ser incentivada em todos os seus domínios”, de modo a evitar uma “visão mercantilista da Ciência e uma excessiva tecnocracia”.

Mas não se falou apenas do papel do Estado no financiamento da investigação. Os seus estudos, nomeadamente em combustão preenchendo e química atmosférica, ocuparam parte significativa da viva e longa entrevista que nos concedeu.

Química – Foi-lhe atribuído o Prémio Ferreira da Silva 91, o que contempla um determinado trabalho. Gostaria que nos falasse um pouco sobre o significado deste prémio.

António Varandas – O Prémio Ferreira da Silva não contempla um trabalho específico, mas o conjunto de uma actividade desenvolvida em passado recente, sendo a candidatura apresentada sob proposta de uma Comissão*. No entanto, estou convencido de que, daquilo que fiz nos últimos anos, o que terá tido mais impacto tem a ver com o cálculo e a representação analítica de superfícies de energia

* Nota: O Regulamento do Prémio Ferreira da Silva foi publicado no Boletim n.º 5 (1981).



potencial, isto é, a função potencial que rege o movimento dos núcleos numa molécula, ou supermolécula correspondente à espécie intermediária de uma reacção química. Neste domínio, penso que o grupo de investigação que dirijo em Coimbra deu um contributo bastante original, passe a imodéstia.

Química – Essa sua equipa envolve quantas pessoas? Fale-nos desse núcleo de investigadores.

A.V. – É uma equipa relativamente pequena embora o INIC a tenha considerado com dimensão apreciável para o tipo de domínio, do que me permito discordar. Trata-se de um grupo de investigadores, em que sou o único Professor, todos os restantes elementos são investigadores em vias de preparação de doutoramento ou recém-doutorados. Destes meus colaboradores, apenas dois têm vínculo à Universidade de Coimbra. Dos restantes, dois são espanhóis, concluíram já os seus doutoramentos e regressaram a Espanha. Um destes, docente da Universidade de Salamanca, continua a manter comigo trabalho de colaboração. Um outro

colaborador, da Universidade do Porto, também concluiu já o seu doutoramento, mantendo igualmente trabalho de colaboração comigo. Vejo-me, pois, novamente reduzido a um núcleo de três investigadores. Esta situação é pouco comum entre nós, dado que em grande parte dos casos os doutorandos têm vínculo institucional, o que leva os grupos a um crescimento permanente. No meu caso tal não aconteceu.

Química – Porque não houve um crescimento orgânico do núcleo de investigação?

A.V. – Sucedeu aquilo que normalmente sucede em instituições estrangeiras. Por exemplo, após ter concluído o meu doutoramento sob a orientação do Professor J. N. Murrell, na Universidade de Sussex, outro estudante de pós-graduação terá entrado para o grupo. Também em Coimbra, após a saída dos três doutores a que aludi, acaba de entrar, financiado pela JNICT, um jovem estudante para preparação de doutoramento, havendo perspectivas para entrada de um outro. Refira-se ainda que, recentemente, houve a possibilidade de vinda de dois

A. J. C. Varandas: perfil breve de um investigador

A. J. C. Varandas iniciou os seus estudos universitários em Coimbra, tendo-os concluído na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto em 1971 com a licenciatura em Engenharia Química-Industrial. Revelando grande aptidão para matérias de índole teórica, decidiu após conclusão da licenciatura regressar a Coimbra onde iniciou trabalhos de investigação no domínio das Forças Intermoleculares de longo alcance usando teoria das perturbações. Destes estudos resultaram quatro artigos em revistas internacionais da especialidade, um dos quais da sua exclusiva autoria.

Em 1973 iniciou a sua tese de doutoramento em Química Teórica sob a orientação do Professor John N. Murrell em superfícies de energia potencial. Efectuou então cálculos mecânico-quânticos em dímeros de gases raros usando teoria das perturbações com simetria da função de onda, cálculos *ab initio* por métodos supermoleculares e desenvolveu modelos semiempíricos de superfícies de energia potencial para uso em estudos de dinâmica molecular. Da sua tese e ainda de outros trabalhos feitos em colaboração resultaram sete artigos, um dos quais foi apresentado na Faraday Discussion of the Chemical Society em 1977. A sua estadia em Sussex contribuiria para marcar profundamente a sua investigação futura através do estabelecimento de uma colaboração estreita com a Universidade de Sussex após o seu regresso a Coimbra. Tal colaboração culminaria com a escrita de um livro "Molecular Potential Energy Functions" (Wiley, 1984), que constitui o primeiro estudo monográfico dedicado a este tema.

É, desde 1988, Professor Catedrático de Química na Universidade de Coimbra.

O seu currículo conta com mais de oitenta trabalhos científicos publicados em revistas de excelente qualidade, com realce para alguns dos

aspectos mais relevantes da sua investigação nos últimos cinco anos, que se distribui pelas áreas da Estrutura Electrónica Molecular, Forças Intermoleculares, Superfícies de Energia Potencial e Dinâmica das Reacções Químicas.

A actividade científica de A. J. C. Varandas tem-se dirigido ao estudo teórico-computacional da energética e dinâmica de reacções químicas elementares. Com relevância em áreas de interesse prático e social como seja o desenvolvimento de *lasers* e a compreensão e modelagem da química da atmosfera e dos processos de combustão, além do interesse científico *per se*, os estudos que desenvolve assentam num formalismo matemático elaborado e num forte recurso ao computador.

Poder-se-á dizer que são duas as etapas fundamentais envolvidas no estudo teórico de uma reacção química elementar. Na primeira é calculada a função ou superfície de energia potencial que rege o movimentos dos núcleos, enquanto que na segunda são resolvidas as equações de movimento destes últimos sob a acção daquele potencial. Qualquer destas etapas representa por si só um problema computacional complicado que necessita para uma resolução eficiente de bons meios de cálculo científico intensivo.

Na impossibilidade de um cálculo exacto do potencial molecular para a maioria das reacções químicas, torna-se imperioso recorrer a métodos semiempíricos em que se impõem ao potencial certos atributos essenciais aos estudos dinâmicos. É neste contexto que surge, plenamente desenvolvido por A. J. C. Varandas, o método conhecido por "expansão dupla multicorpos" ou DMBE (da sua designação em inglês "double many-body expansion"). Combinando judiciosamente cálculos de estrutura electrónica molecular com informação experimental, A. J. C. Varandas

põe, pela primeira vez, em devida apreciação o papel importante das forças intermoleculares de longo alcance em estudos de dinâmica química mesmo no caso de reacções que ocorram sujeitas a uma barreira de energia potencial. Apesar de recente, este seu método conta já algumas aplicações de apreciável sucesso, como seja a melhor superfície de energia potencial publicada para o sistema formado por três átomos de hidrogénio (H_3) – um protótipo fundamental da reactividade molecular – e a mais rigorosa publicada até ao presente para qualquer espécie poliatómica. Também a superfície DMBE para o estado fundamental do radical hidroperóxido (HO_2) tem sido reconhecida como a mais realista existente para este sistema de grande importância em química dos processos de combustão. Este método por si desenvolvido goza de reconhecido prestígio internacional, sendo os potenciais DMBE muito utilizados em estudos de dinâmica molecular.

Usando potenciais DMBE, A. J. C. Varandas publicou ainda vários estudos sobre dinâmica de reacções químicas elementares, destacando-se os sistemas hidrogénio-oxigénio com importância para a compreensão dos processos de combustão e química da atmosfera, nomeadamente do ciclo de depleção do ozono. Para a interpretação da energética de uma reacção química elementar e racionalização da correspondente dinâmica, propôs ainda um esquema inovador conhecido por "diagrama triangular optimizado" que permite a visualização do potencial molecular bem como trajectórias que nele ocorram. Publicou também estudos sobre caos determinístico em sistemas poliatómicos pequenos com vista à elucidação de reacções unimoleculares.

Recebeu o Prémio Artur Malheiros Ciências Físicas e Químicas 1985 da Academia das Ciências de Lisboa

estudantes chineses, o que só não aconteceu por razões burocrático-políticas a que não vale a pena aludir.

Química – *Mas há uma componente internacional na sua investigação, para além dessas colaborações que referiu. O facto de dois investigadores chineses quererem vir trabalhar consigo resulta do seu trabalho ser conhecido no exterior, ou é comum receberem-se tais pedidos?*

A.V. – Não creio que seja comum, pelo menos ao nível de estudantes para preparação de doutoramento. Julgo poder dizer que se deve em parte ao reconhecimento internacional de que falou, pelo menos assim concluo das respectivas cartas para pedido de ingresso. O mesmo penso ter-se passado com os estudantes espanhóis. Todavia, embora tenha sido até aqui algo afortunado, sinto que existe uma dificuldade real em cativar estudantes para a investigação no domínio teórico.

Química – *Porquê?*

A.V. – Penso ser uma questão de mercado de emprego e também de política científica nacional. Talvez se julgue que a saturação do mercado se atinge mais facilmente para os químicos teóricos, o que duvido, dada a sua preparação químico-computacional. Ou se pense que “fazer química teórica é um luxo”, talvez porque os resultados alcançados poderão não ter uma aplicação imediata. Por outro lado, trata-se de um domínio mais abstracto, para o qual são, em geral, atraídos alunos com uma maior inclinação para a física e matemática. Finalmente, é de referir que a Química, talvez por se tratar de uma ciência clássica, não constitui actualmente um dos principais pólos de atracção para os estudantes que ingressam nas universidades. Talvez a Comunicação Social possa ter nesta matéria um papel importante, tentando impedir que seja distorcida a realidade científica nacional. Enfim, a dificuldade em conseguir alunos para a Química Teórica existe...

“EXPLOÇÃO” DE BOLSAS

Química – *As orientações estratégicas recentes apontam para rentabilizar a curto prazo os*

investimentos em investigação o que implica o deslocamento dos investigadores para áreas aplicadas. Até que ponto isso constitui uma dificuldade no seu caso?

A.V. – Constitui, certamente, uma dificuldade adicional, ficando-se a dever exclusivamente à falta de visão de quem negligenciar o papel importantíssimo da investigação fundamental. Refira-se, aliás, que o termo “área aplicada” é difícil de definir, se bem que eu entenda o que se quer dizer. Referirei, contudo, que os estudos teóricos podem ter aplicação imediata em muitos casos, nalguns suprimindo mesmo informação impossível, ou difícil, de obter pela via experimental.

Química – *Mas não é só um problema quantitativo. A qualidade também conta...*

A.V. – Concordo inteiramente.

Química – *Mas as pessoas actualmente também têm que ponderar o que vão fazer depois do doutoramento, mesmo que tenham interesse por uma dada área. Houve até aqui grandes facilidades na concessão de bolsas para doutoramento. Mas, e depois deste concluído?*

A.V. – Embora o processo seguido tenha contribuído para aumentar o número de investigadores, o que considero positivo, a eventual necessidade de baixar o nível de exigência, face ao apreciável número de bolsas a atribuir e ao escasso número de candidatos disponíveis, pode vir a ter consequências perniciosas. A gravidade da situação criada com a súbita explosão do número de bolsas é, pois, preocupante, principalmente nas universidades. Efectivamente, não considero nula a probabilidade de um bom aluno poder, no futuro, vir a ter dificultado o seu ingresso na carreira universitária em consequência do número de doutores resultante desta “explosão”, a menos que a admissão na própria carreira seja alterada. Também a perspectiva de melhor sucesso face ao mercado empregador, ou seja, a Indústria, deverá melhorar para os doutorandos. Não estou certo de que tal esteja a acontecer, embora pense que esse é o caminho correcto, aliás seguido noutros países.

Química – *Como vê toda esta situação em torno da extinção do INIC?*

A.V. – Com preocupação, pois a maior parte da minha investigação tem contado com o apoio do INIC. Não que as verbas de que tenha beneficiado tenham sido vultuosas, ou até mesmo suficientes, mas porque penso que o princípio da existência de um órgão de coordenação da investigação científica a nível nacional está correcto. De facto, uma visão meramente regionalista da investigação pode encerrar muitos perigos. Assim, não me preocuparia a extinção do INIC, se, antes desta consumada, se tivesse optado pela criação de uma estrutura hierarquicamente superior, por exemplo, um ministério para a investigação científica. De momento, tudo me parece incerto e confuso.

ESTIMULAR INVESTIGAÇÃO FUNDAMENTAL

Química – *Mas a preocupação actual parece ser de apoiar a investigação aplicada em detrimento da fundamental...*

A.V. – Obviamente que penso ser um erro crasso. Ainda há dias li, num jornal diário, uma entrevista com Kenichi Fukui, Prémio Nobel da Química, onde se afirmava que a tecnologia estaria demasiado exarcebada relativamente à ciência fundamental. Usando a analogia daquele cientista, tal como o organismo humano se satura de um determinado alimento ou de uma necessidade biológica, também o organismo científico se deveria saturar com o excesso tecnológico. Mas nós (Portugal) ainda não atingimos o excesso tecnológico, e daí o nosso “organismo científico” cuidar mais das necessidades imediatistas. Penso, pois, que a investigação fundamental deve ser estimulada, por si mesma, em todos os seus domínios, todos eles de igual relevância, não me parecendo correcto privilegiar a investigação aplicada em detrimento da fundamental. Deve-se evitar uma visão mercantilista da Ciência e uma excessiva tecnocracia. A perspectiva que traçou para a investigação fundamental é, pois, preocupante, embora, felizmente, essa política não me pareça ser seguida noutros países da Comunidade

Europeia, mesmo em muitos com dimensão semelhante à nossa.

Química – *Como a Holanda, a Suíça, a Bélgica...?*

A.V. – Sim, e a Espanha também. Nestes países julgo que o investimento em investigação científica é significativamente maior. É certo, como dizem alguns colegas meus espanhóis, que a investigação científica portuguesa é de boa qualidade. Porém, tal constatação não chega, podendo, em parte, traduzir apenas uma maneira simpática de omitir a desproporção no volume da investigação efectuada nos dois países da Península Ibérica, tido em conta, naturalmente, o *ratio* do número de investigadores.

Química – *Essa diferença resulta de quê?*

A.V. – Certamente que de vontades políticas diferentes...

Química – *Apesar do cenário pouco brilhante, não se vislumbra nas suas palavras a ideia de desistência. Como perspectiva o futuro da sua investigação?*

A.V. – De modo nenhum a ideia de desistência, pois vencer dificuldades é, naturalmente, apanágio de qualquer cientista... As que referi são criadas pelo Homem, mas tudo farei também para vencê-las. Só assim se poderá compreender que, em matéria de cálculo, a situação nunca tenha sido tão boa em Coimbra como é actualmente. Efectivamente, com a ajuda de alguns colegas, foi possível adquirir para a Universidade de Coimbra, através do Programa Ciência, um supercomputador VAX 9000-210VP, o que confere um poder de cálculo pelo menos dez vezes superior ao até aqui disponível. Só que, com a autonomia das Universidades, veio também a necessidade de o tempo de cálculo ter que ser suportado pelos utilizadores. E estes custos podem atingir verbas apreciáveis, pois uma hora de cálculo pode ascender a uma dezena de milhares de escudos, ou mesmo mais, consumindo o meu grupo dezenas de horas de cálculo por semana. Surge, assim, uma nova dificuldade, que encontra agravantes na indefinição, espero que momentânea, vivida

actualmente em matéria de política de investigação. Mas desta já falámos o suficiente.

PAPEL DO ESTADO

Química – *Há grandes dificuldades para o próprio pagamento de artigos...*

A.V. – Alguma, mas esse é um problema menor. Um que certamente considero bastante mais grave no meu caso, é o não ter ainda tido a oportunidade de contratar qualquer investigador graduado, entenda-se "pós-doc", que me auxilie no desenvolvimento de novos projectos de investigação. E não é porque tal não tenha, com insistência, solicitado nos meus relatórios de investigação para o INIC, pese também a apreciação muito meritória que é feita da actividade científica que desenvolvo. Talvez a Comunicação Social possa também aqui ajudar, dando a conhecer, com realismo e objectividade, o que se faz no estrangeiro nesta matéria. Efectivamente, só tive um colaborador pós-doutorado, neste caso uma investigadora espanhola da Universidade de Valladolid, embora subsidiada por Instituições do seu país...

Química – *Ao longo da nossa conversa já falou várias vezes da Comunicação Social. Até que ponto os vários investigadores não têm também descurado um pouco o "marketing" da investigação? Dou-lhe um exemplo: é mais fácil aos jornalistas portugueses falar com um Prémio Nobel americano do que com um investigador português do qual se quer conhecer o trabalho.*



A.V. – Desconhecia totalmente essa situação. Acho mesmo caricato que tal possa acontecer. Contudo, se não houver equilíbrio na abordagem dos vários domínios científicos, então a Comunicação Social pode agravar ainda mais a distorção na procura dos vários cursos universitários, devido à menor novidade que certos domínios possam ter, particularmente, como já frisei, os mais clássicos, onde incluo a Química. Assim, o contributo da Comunicação Social, para ajudar a reequilibrar uma sociedade que tem tendência a desequilibrar-se devido ao exacerbar das necessidades mais imediatistas é, certamente, importante.

Química – *Mas essas correcções não deverão ser antes feitas pelo poder público?*

A.V. – Sem dúvida que sim, em grande parte. Mas não quero deixar de bater também à porta da Comunicação Social... Ao Estado reservaria duas tarefas de extrema importância: financiar com objectividade e universalidade a investigação, sobretudo, naturalmente, a fundamental, e coragem política para, uma vez garantidas boas condições de trabalho, exigir produção de investigação científica de boa qualidade, e em quantidade compatível com a dimensão da comunidade científica portuguesa. Só assim se poderá compatibilizar, por exemplo, qualidade da investigação produzida com justiça na progressão académica universitária. Uma outra missão que ao Estado deve caber, não menos importante que as que já referi, é, naturalmente, o dever de dignificar a carreira universitária através de remunerações dignas e justas.

INVESTIGAÇÃO É ESSENCIAL

Química – *De qualquer maneira, em relação a esta evolução que se verifica na comunidade científica portuguesa, também é um bocadinho uma crise de crescimento, porque nos anos 60, por exemplo, e salvo raríssimas excepções, não havia praticamente nada em termos de investigação.*

A.V. – Gostaria de discordar um pouco dessa afirmação, dependendo da perspectiva como o problema é encarado. Não há dúvida que, em

termos absolutos, a produção científica actual é bastante maior. Contudo tal pode reflectir apenas a maior dimensão da comunidade científica portuguesa actual e o maior intercâmbio científico-cultural com outros países. Mas a motivação para fazer investigação e para seguir uma carreira universitária talvez não seja maior actualmente. Por exemplo, a nível económico, quando em 71,72 iniciei a carreira académica, ou mesmo como tirocinante no meu segundo ano de Universidade, auferia vencimentos que me permitiam, nas circunstâncias, viver tão ou mais desafogadamente do que agora, passe a comparação. Finalmente, não me parece correcto pensar-se que o equipamento científico adquirido na década de 60 fosse menos sofisticado do que o que actualmente dispomos. É uma questão de evolução.

Química – Mas isso foi já depois de terem começado os bolseiros do Instituto de Alta Cultura, antes disso não havia praticamente nada.

A.V. – Claro.

Química – Bom, por exemplo em termos de publicações científicas se comparar o que é feito hoje pela comunidade química portuguesa com o que era feito nos anos sessenta...

A.V. – Sim, parece-me um índice de avaliação plausível. Só que deverá ser feita a comparação com o que acontecia noutros países na mesma época...

Química – Ainda estamos abaixo...

A.V. – Creio que sim...

Química – Mas em relação ao que se passava nos anos 60, estamos muito melhor neste momento.

A.V. – Sobre alguns pontos de vista, sim, por exemplo, em se encarar a investigação científica como algo essencial para o desenvolvimento das nações, e não como uma actividade meramente académica. Todavia o empenhamento na motivação dos meios humanos e apetrechamento laboratorial não me parece, como já referi, compatibilizado com tal perspectiva. Basta ver a pobreza dos nossos

laboratórios..., o que é, certamente, muito desmotivador para os estudantes, futuros investigadores.

Química – Mas a tradição científica portuguesa não é grande, quando comparada com outros países europeus.

A.V. – Concordo, mas como disse, tudo passa por um padrão de comparação. Os países que na altura estavam em circunstâncias parecidas com as nossas, como por exemplo a Espanha, encontram-se agora melhor. Outros, como por exemplo a Inglaterra, que estavam em muitíssimo melhor situação, talvez estejam hoje menos bem posicionados. É um pouco o biorritmo dos países. Direi pois, que a saúde da nossa investigação não é sólida, mas acredito que se possa estar em fase de recuperação.

TERAPIAS E TERAPIAS

Química – Tem havido injeções bastante grandes de dinheiro para equipamento, mas quase nada para custos de operação...

A.V. – É isso. E obviamente que o equipamento não funciona sozinho...

Química – Corre-se o risco de ter o equipamento e de ele não poder funcionar, o que é um desperdício de dinheiro...

A.V. – Tem toda a razão. Acresce que a maioria dos investigadores seniores têm tarefas de gestão, o que é perfeitamente natural. Tal facto mais acentua a necessidade de se criarem posições de pós-doutoramento. Assim, diria que o dinheiro investido em ciência é bem-vindo e fundamental. Todavia, um remédio, mesmo que correctamente prescrito, se for tomado em doses excessivas, pode, actuando como um veneno, ser letal. A meu ver, a "terapia" correcta passa por doses adequadas, tomadas em tempo certo, dos vários "medicamentos", passe a analogia de alguém que é leigo em medicina.

Química – Voltando aos aspectos mais químicos gostava que nos falasse um pouco das aplicações que os seus estudos têm, nomeadamente em combustão e na química atmosférica.

A.V. – Começarei por dizer que o tema dos estudos realizados no meu grupo é, de certo modo, auto-contido, indo desde a determinação da superfície de energia potencial molecular, obtida por cálculos de estrutura electrónica, até ao estudo da dinâmica das reacções químicas que ocorrem sob a acção desses potenciais. Embora para o químico teórico, qualquer sistema possa ter igual interesse científico *per se*, não deixa de constituir uma motivação adicional o seu impacto prático ou social. Daí o termos prestado atenção especial ao radical hidropéroxilo, HO₂, e à molécula de ozono, O₃, em ambos os casos no correspondente estado electrónico fundamental. O primeiro sistema representa a espécie intermediária das reacções O + OH → O₂ + H, responsável pela existência de oxigénio pulmonar na alta atmosfera, e sua inversa, H + O₂ → OH + O, considerada a reacção mais importante em combustão. Dedicamos também bastante atenção à reacção O + O₃ → 2O₂, processo elementar importante no equilíbrio do ozono na atmosfera, e que envolve o conhecimento da superfície de energia potencial para o estado tripleto fundamental do sistema O₄. Em ambos os casos os potenciais utilizados foram obtidos usando o método da expansão dupla multicorpos, por mim proposto em 1984, e internacionalmente conhecido pela sigla DMBE de *Double Many-Body Expansion*. Em suma, os nossos estudos vão do cálculo do potencial molecular ao cálculo do coeficiente termalizado de velocidade, isto é, à cinética, passando pelos parâmetros microscópicos de reactividade. Refira-se que os processos de combustão e a química atmosférica envolvem sistemas cinéticos multicomponente bastante complicados, portanto um número grande de reacções elementares. Estudámos apenas algumas dessas reacções, diria aquelas que mais influenciam a modelagem do processo multicomponente global, e que, portanto, devem ser conhecidas com pequena margem de erro.

VISAR A "ÁRVORE"

Química – Esses processos elementares que estudaram, para os quais determinaram as equações de Arrhenius, isto é, a dependência da constante de velocidade na tempe-

ratura, foram utilizados por investigadores estrangeiros para a modelação de reacções complexas.

A.V. – É possível, mas sobretudo como suporte aos resultados experimentais. Por exemplo, no caso da reacção $H + O_2$, e da sua inversa, foi gratificante a boa concordância obtida com medições recentemente efectuadas por grupos americanos, nomeadamente de Argonne, que se supõem ser as melhores existentes. Refira-se que os valores experimentais até hoje publicados diferem apreciavelmente entre si, daí o interesse e actualidade que os estudos teóricos continuam a ter, também por esta razão.

Química – Os estudos que tem desenvolvido tem sido com espécies pequenas, do monoatômico ao tetraatômico. Como vê a extensão a moléculas maiores?

A.V. – Começaria por frisar que o facto de estudar reacções elementares, envolvendo sistemas com poucos átomos, não se deve confundir com simplicidade, no sentido de banalidade. De facto, só nos últimos dois anos foi possível avançar significativamente no cálculo *ab initio* da reacção mais simples, a que envolve três átomos e três electrões. Estou, obviamente, a falar da reacção $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$. Refira-se, a propósito, que muitos destes estudos utilizaram o potencial DMBE para o sistema H_3 , publicado em 1987.

Química – Elementar, mas não trivial...

A.V. – Sim, nada trivial.

Química – Bom, mas a questão anterior era no sentido de saber se há neste momento alguma limitação que impeça que se avance para moléculas maiores...

A.V. – Conceptualmente, não há. No entanto, direi que em Ciência podem existir duas atitudes. Uma, minuciosa, pretende levar às últimas consequências e análise de um determinado sistema, modelo ou teoria. Visa-se a “árvore”, não a “floresta”. Outra, pretende ter uma visão global da “floresta” sem cuidar do que se passa ao nível da “árvore”. Na série de

trabalhos a que tenho aludido, temos de certo modo adoptado a primeira atitude. Desenvolvemos um modelo de potencial realista, com fundamento semi-teórico, para sistemas diatômicos, posteriormente generalizado a sistemas poliatômicos, embora, por razões de simplicidade, tenhamos concentrado a atenção em sistemas com até quatro átomos. Refira-se que para um sistema diatômico a função potencial é uma curva num espaço bidimensional, para um triatômico é já uma hipersuperfície num espaço a quatro dimensões – três das quais correspondem às separações interatômicas –, e para um tetraatômico precisamos já de um espaço a sete dimensões para representar a função potencial. Assim, se para dois átomos o problema é já complicado, o problema maior com sistemas tetraatômicos é que “têm dois átomos a mais”...

EFEITO DAS FORÇAS DE VAN DER WAALS

Química – A dimensão do espaço é a das combinações n dois a dois, $\binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$

A.V. – Certo. Portanto o método DMBE é geral, porque, em princípio, é aplicável a qualquer sistema, através de um desenvolvimento multicorpos duplo, envolvendo as energias Hartree-Fock generalizada e de correlação dinâmica, e tidas em conta as regras de correlação espacial e de spin do sistema em análise. Mesmo sem entrar em detalhes, é fácil perceber que as coisas se podem complicar bastante, mesmo para sistemas com poucos átomos. No entanto, temos aplicado com sucesso o método DMBE a sistemas com até quatro átomos, embora o número de sistemas tetraatômicos estudado seja ainda muito pequeno. O objectivo é, dentro da aproximação de Born-Oppenheimer, obter uma função potencial realista que permita descrever qualquer processo de colisão a ela sujeito, reactivo ou não. Por exemplo, com o potencial para o sistema O_4 , procurámos racionalizar não apenas a dinâmica e cinética da reacção $O + O_3 \rightarrow 2O_2$ mas também estimar o segundo coeficiente de virial do oxigénio molecular em fase gasosa. Naturalmente, os potenciais DMBE poderão tornar os estudos de dinâmica molecular mais dispendiosos do ponto

de vista computacional, dada a sua maior “complexidade”. Todavia, creio ser preferível investir horas de um Cray utilizando um potencial realista do que metade desse tempo num modelo a que falte realismo físico. Daí o uso que tem sido dado aos nossos potenciais pela comunidade científica.

Química – Como compara o computador que tem em Coimbra com o Cray?

A.V. – Refere-se certamente ao VAX 9000-210VP, acabado de instalar. Não fizemos “benchmarks” nesse sentido, embora julgue que um CRAY Y-MP tenha uma velocidade LINPACK cerca de dez vezes superior. Todavia, numa operação global custo/“performance”, e aproveitamento do “know-how” existente em Coimbra, parece-me ter sido uma boa escolha. Obviamente, estamos ainda longe dos melhores centros mundiais, mas esse não é o problema maior como creio ter já deixado ficar claro. A falta de dinâmica e massa crítica de investigadores, bem como o delinear de objectivos a atingir com uma utilização óptima dos recursos disponíveis, esses são outros problemas tão ou mais importantes.

Química – Para um químico, as reacções em solução são essenciais. Como vê a extensão dos seus trabalhos ou outros no sentido de incluir o solvente?

A.V. – É uma questão importante, mas cuja resposta não é fácil. Ao falar de reacções em solução parece que o objectivo é mais a “floresta” do que a “árvore”, na linguagem atrás utilizada. Mas admitamos que não. Bem, neste caso, e uma vez que não faria sentido procurar a função potencial para toda a fase condensada, talvez se pensasse em nos cingirmos às espécies em reacção e a uma, duas, ou mais moléculas do solvente. Do ponto de vista do químico teórico a supermolécula em estudo passaria então a ser constituída pela espécie intermediária da reacção propriamente dita, e pelas moléculas de solvente que decidíssemos incluir. Obviamente que a dimensão do espaço configuracional aumentaria exponencialmente, levando a um acréscimo idêntico na dificuldade de resolução do problema

computacional. Mas, por vezes, mesmo em fases condensadas, hipóteses drásticas, com vista à simplificação do problema, revelam-se interessantes e produzem resultados quantitativamente correctos. Dou-lhe um exemplo. Em colaboração com um grupo da Universidade de Minneapolis, estudámos a cinética da reacção $H + H_2$ e isotopómeros, em fase gasosa, a temperaturas próximas do limiar do zero absoluto, utilizando teoria variacional do estado de transição. Um dos objectivos era observar o efeito das forças de van der Waals no controle da reactividade a baixas temperaturas, um outro era comparar os resultados calculados com medições experimentais obtidas em fase sólida. A concordância foi bastante satisfatória, o que leva a crer que o principal mecanismo de reactividade a tais temperaturas se deve ao efeito de túnel do átomo de hidrogénio através da barreira de potencial para a reacção de troca, *e. g.*, $D + H_2 \rightarrow DH + H$. Tal concordância pode explicar-se, em parte, também pela mobilidade da molécula de hidrogénio no retículo cristalino, quase se passando como se o efeito das moléculas de H_2 vizinhas se pudesse ignorar numa primeira aproximação.

ARGUMENTOS NÃO CIENTÍFICOS

Química – Foi co-autor com o Professor Formosinho do Modelo de Intersecção de Estados (M.I.E.). Quer falar-nos sobre esse modelo?

A.V. – É o exemplo típico de um caso em que se ignoram os detalhes “microscópicos” específicos de cada sistema com vista a poder ter uma perspectiva abrangente. Despiu-se a teoria da sua complexidade multidimensional, procurando-se uma “coordenada de reacção” efectiva que ligasse os reagentes aos produtos. Sem dúvida que se terão perdido detalhes importantes, mas esperamos que tenham subsistido os ingredientes determinantes da reactividade. Não entrarei em pormenores, pois creio que o M.I.E. é já minimamente conhecido. Embora tenha colaborado sobretudo nos aspectos formais do modelo, creio que o Professor Formosinho e seus colaboradores o têm desde então aplicado com sucesso a muitos sistemas de interesse em química,



embora, como o próprio me tem dito, a publicação dos resultados nem sempre tenha sido fácil. Curiosidades, algumas dos bastidores da Ciência... Efetivamente, quando se propõe uma determinada teoria, existindo outra bem sucedida, é difícil vencer a barreira inercial oferecida pela comunidade científica.

Química – Não há uma dificuldade maior *facto* dessas teorias provirem de países menos desenvolvidos cientificamente (o que em princípio não devia suceder)?

A.V. – Creio que sim, mas também esses Países não estão totalmente isentos de responsabilidade por falta de uma boa política científica, neste caso de “marketig”. A testemunhar a importância do local de origem, embora certamente o trabalho valha por si mesmo, está o *facto* do potencial DMBE para o sistema H_3 , calculado durante uma visita minha, em Julho de 1985, ao grupo do Professor Truhlar em Minneapolis, ter sido muito utilizado não obstante existirem na altura potenciais alternativos de boa qualidade para este sistema, um deles desenvolvido pelo grupo do Professor Truhlar e outro por mim próprio, ambos do final da década de 70. Isto para não falar do bem conhecido potencial de Porter e Karplus para o sistema H_3 , dos meados da década de 60, ainda hoje utilizado com alguma frequência. Todavia, em muitos casos, é possível encontrar uma explicação para a referida inércia da comunidade científica. Por exemplo, uma vez utilizado para testar uma dada teoria

dinâmica, o mesmo potencial será por via de regra utilizado para testar todas as outras teorias dinâmicas que vierem a surgir, pois só assim os respectivos méritos podem ser apreciados em pé de igualdade. O mesmo se passa em dinâmica molecular não reactiva, *e. g.*, o potencial de Lennard-Jones, dos anos 20, devido à sua simplicidade, ainda hoje é utilizado em estudos de simulação computacional, não obstante existirem potenciais muito mais realistas para a maioria dos sistemas de interesse químico. Existe, no entanto, um outro tipo de passividade bem mais preocupante, geralmente oriundo da comunidade científica do país de origem. É que, com tristeza, vejo, por vezes, o produto nacional ser preterido em benefício do estrangeiro. Se for por motivos de qualidade ou princípios científicos inteligíveis, não poderei deixar de concordar. Sou, todavia, totalmente fechado a argumentos não científicos. Enfim, precisamos de sentir algum “amor patriótico”, recordando uma conversa televisiva a que assisti numa noite destas, e de que, sinceramente, gostei muito...

Química – Está a aludir à posição defendida pelo Dr. Veiga Simão no debate televisivo sobre a Educação em Portugal em que se juntaram três ex-ministros da Educação e um deputado?...

A.V. – Exactamente. Concordo com o ponto de vista do Professor Veiga Simão, desde que devidamente interpretado. Assim, não me refiro a um patriotismo cego, não científico, mas a uma vontade permanente de querer mostrar que Portugal não é uma mera parcela da geografia mundial mas um povo que ainda hoje pode dar contributos à ciência mundial, merecedores de apreço, pese a nossa modesta dimensão. Se valermos agora pelo querer, talvez possamos um dia valer pelo poder... Assim nos sejam dados os meios para que tal se torne possível.

Química – Gostaria de acrescentar algo mais?

A.V. – Apenas o meu sincero agradecimento a todos os meus colaboradores, nacionais e estrangeiros. Só com a sua valiosa ajuda foi possível o que fizemos.

Química Teórica & Computacional

Aplicações em Estrutura e Dinâmica Molecular

A. J. C. VARANDAS *

Discutem-se desenvolvimentos recentes na área da química teórica/computacional com especial ênfase no cálculo de superfícies de energia potencial e dinâmica de reacções químicas elementares.

INTRODUÇÃO

Com o apoio das ciências exactas o Homem tem procurado racionalizar e quantificar os fenómenos do mundo microscópico e macroscópico. Devido à sua importante contribuição para esta visão global do Universo, a Química assume hoje um papel vital no mundo.

Principal responsável pelo ritmo acelerado de progresso a que temos assistido nas últimas décadas, o computador permitiu ao Homem reduzir de séculos a décadas, a anos, e mesmo a fracções do ano ou mês o tempo que medeia entre a descoberta científica e a sua aplicação. De facto, o uso de computadores está generalizado. Sem ele o cientista fica incapacitado de efectuar os muitos milhares ou milhões de operações numéricas necessárias ao tratamento estatístico das suas medições laboratoriais ou à exploração quantitativa da sua teoria preferida. Pode dizer-se que – com o aparecimento e evolução do computador, minicomputador, computador pessoal e supercomputador – se iniciou há cerca de quarenta anos uma nova era sócio-económica, que, por analogia com o passado onde distinguimos as idades da pedra, do bronze e do ferro, é geralmente referida como a idade do computador. E, como então, as ferramentas continuam a caracterizar a dimensão e o poder do Homem: no passado, a dimensão física, no presente, a intelectual.

Como procurarei realçar, a Química sentiu profundamente o

começo desta nova era. Podendo ser definida como a ciência que estuda os rearranjos dos átomos a nível molecular, a Química visa o estudo e compreensão das propriedades estruturais das substâncias e o modo como estas se transformam nas reacções.

Se bem que a hipótese da estrutura atómica da matéria tenha sido proposta na Antiguidade Clássica por Demócrito e Lucrécio, deve-se a Dalton o moderno conceito de átomo, e a Rutherford (1911) as propriedades gerais da estrutura atómica. Contudo, cedo se verificava que uma compreensão plena da estrutura atómica e molecular da matéria não podia ser feita à luz dos princípios da mecânica, óptica e electrodinâmica clássicas. Seria nos anos vinte, com os trabalhos de Schrödinger (1925, 1926), Heisenberg (1926a, 1926b), Pauli (1925), Dirac (1926) e outros, que surgia uma nova mecânica – mecânica quântica – à luz da qual todos os fenómenos químicos pareciam encontrar uma explicação racional. Se bem que já nessa altura alguns problemas de fundamental interesse tivessem sido resolvidos de modo a comprovar a validade da nova teoria atómica [e.g., os cálculos efectuados por Heitler e London (1927) na molécula de hidrogénio], os avanços mais espectaculares nas aplicações da mecânica quântica a sistemas polieletrónicos só viriam a surgir com o aparecimento do computador nos anos cinquenta. Assim, é natural que muitas vezes se associem os aspectos teórico e computacional sob a designação de química teórica.

É ainda legítimo que se atribua às experiências computacionais um papel de importância semelhante, na sua complementaridade, ao das experiências convencionais de

laboratório. Aquelas diferem destas no facto de as primeiras utilizarem átomos, moléculas e radiações simuladas e não entidades reais. Se esta pode constituir a maior dificuldade na justificação do resultado teórico, não deixa, por outro lado, de ser também uma das suas maiores virtudes ao possibilitar a realização de experiências de difícil, senão impossível, concretização laboratorial. Pode, pois, dizer-se que cabe à química computacional não apenas o papel de racionalizar os resultados laboratoriais à luz de um modelo matemático, e.g. a equação fundamental da mecânica quântica devida a Schrödinger, mas também o de, com base em informação normalmente inacessível pela via laboratorial, fazer previsões para sistemas afins ainda não estudados laboratorialmente.

Como se sabe, no mundo macroscópico, as grandezas observadas reflectem médias referentes a um número de espécies moleculares da ordem de grandeza do número de Avogadro. Todavia, espera-se que os valores medidos dependam intimamente dos fenómenos de colisão que têm lugar ao nível molecular. Para um sistema multicorpos com tal dimensão é, porém, impensável pretender resolver as equações do movimento mesmo que, para tal, se tivesse ao dispor computadores de gerações futuras. A mecânica estatística procura evitar tal dificuldade definindo os estados do sistema fisicamente acessíveis, associando a cada um daqueles estados uma probabilidade de ocorrência. Procura assim substituir o problema dinâmico – média temporal – por um estatístico – média estatística. Embora, tal como para a mecânica clássica e a mecânica quântica, as bases da mecânica estatística possam ser de natureza axiomática, que apenas carecerão de

validação a *posteriori* através das previsões a que conduzirem, é importante – para que aquele corpo de teorias forme um todo coerente – que os seus princípios possam encontrar uma fundamentação em termos da dinâmica clássica, semiclássica ou quântica que regulam os fenómenos de colisão molecular.

Na impossibilidade de uma demonstração, Boltzmann introduziria em 1871 a chamada hipótese ergódica, estabelecendo a equivalência das médias temporal e de ensemble para qualquer propriedade macroscópica numerável (*e.g.*, Penrose 1970). Postulava assim que a trajectória do sistema no espaço de fase cobria toda a superfície de energia definida pelo princípio da conservação da energia total (*e.g.*, Varandas 1985). Não obstante as dificuldades conceptuais da hipótese ergódica, simulações computacionais realizadas nas duas últimas décadas permitiram estabelecer que o comportamento postulado para sistemas macroscópicos pode ser encontrado mesmo em sistemas infinitamente mais simples formados por dois ou mais osciladores lineares acoplados (*e.g.*: Ford 1973, Brumer 1981, Noid *et al.* 1981, Rice 1981, Tabor 1981, Percival e Richards 1982, Schuster 1988, Morais e Varandas 1992). Em síntese, a mecânica estatística estabelece os princípios e o formalismo matemático necessários ao cálculo de propriedades macroscópicas a partir dos correspondentes parâmetros dinâmicos microscópicos, por sua vez calculados com base num modelo molecular que constitui a essência da química estrutural.

Com a química quântica e o computador é hoje possível prever e racionalizar a maioria das observações experimentais. Não apenas pelas dificuldades, por vezes insuperáveis devido a razões físicas, económicas, e outras, que se colocam a nível laboratorial, mas também pelo seu importante papel racionalizador e precursor de novas experiências, facilmente se reconhece a importância crucial da modelização e simulação computacional em química (Almlöf *et al.* 1988, Clementi 1990).

No que se segue, apresento de modo breve exemplos de estudos teórico/computacionais que estamos a efectuar na área da estrutura e dinâmica molecular. Especificamente,

concentrarei a atenção em estudos de espectroscopia rotovibracional e dinâmica de processos de colisão molecular reactivos utilizando superfícies de energia potencial realistas. Estudos de colisões não reactivas com importância na simulação de processos físicos, *e.g.*, propriedades termofísicas de gases reais simples em regime de diluição infinita (Morais e Varandas 1985, Castro *et al.* 1990, Silva *et al.* 1990, Varandas e Silva 1992) e secções eficazes de troca de spin (Braga e Varandas 1990), não serão aqui abordados. Mais do que aos métodos utilizados, darei relevo aos objectivos e eventual impacto do seu estudo, limitando o formalismo matemático a um mínimo indispensável.

ESTRUTURA MOLECULAR

A solução de qualquer problema molecular passa, em princípio, pela resolução da equação de Schrödinger, tratando os núcleos e electrões em pé de igualdade. Todavia, não considerando casos triviais, a solução exacta de tal problema não é possível. De facto, tal implicaria à partida o conhecimento de um operador hamiltoniano exacto, que por sua vez não se conhece. Todavia podem obter-se resultados de grande interesse qualitativo e quantitativo usando hamiltonianos modelo.

A dificuldade do problema pode ser minimizada – se bem que seja ainda enorme – se atendermos a que a massa do núcleo atómico mais leve, o protão, é cerca de 1837 vezes maior do que a do electrão. Tal simplificação remonta aos primórdios da mecânica quântica, tendo ficado conhecida como aproximação de Born-Oppenheimer (1927) em homenagem aos seus autores. Atendendo à diferença das massas do electrão e dos núcleos, Born e Oppenheimer sugeriram que os seus movimentos fossem tratados independentemente, o que corresponde a admitir que a velocidade dos electrões é de tal modo superior à dos núcleos que os primeiros reajustam instantaneamente as suas posições face a qualquer movimento nuclear. Assim a equação de Schrödinger global divide-se em duas outras: uma respeitante aos electrões para um dado arranjo fixo dos núcleos equação de Schrödinger electrónica – e outra referente ao movimento dos núcleos

sob a acção do potencial efectivo criado pelos electrões – equação de Schrödinger nuclear. Para a maior parte dos fenómenos químicos a aproximação de Born-Oppenheimer pode considerar-se válida.

Da resolução da equação de Schrödinger electrónica resultam conceitos de grande importância em química estrutural como sejam os de geometria molecular e força interatómica (intermolecular), todos eles contidos num mais geral denominado superfície de energia potencial. Além disso, porque o movimento dos núcleos é governado pelo potencial efectivo criado pelos electrões, pode ainda dizer-se que a estrutura electrónica dos átomos e moléculas está na base de toda a química estrutural e dinâmica. Este facto está realçado na afirmação de Bryce Crawford Jr. (1953): “a natureza da ligação química é o problema chave de toda a química”.

O conceito de superfície de energia potencial assume toda a sua dimensão e importância ao unificar vários domínios teóricos e experimentais da química-física (Murrell *et al.* 1984, Hirst 1985, Varandas 1988b). Está no âmago da espectroscopia e é imprescindível no estudo teórico dos fenómenos de colisão molecular. Estando ainda na base da compreensão e cálculo das propriedades macroscópicas da matéria em termos de parâmetros estruturais e dinâmicos das moléculas, o seu interesse multidisciplinar na interpretação de trabalhos em plasmas, *lasers* e poluição atmosférica tem sido crescente.

Apesar das simplificações resultantes da aproximação de Born-Oppenheimer, a dificuldade na resolução da equação de Schrödinger é, em geral, demasiado grande para que possa ser resolvida sem simplificações adicionais. Assim, podem apontar-se três graus de aproximação no estudo da estrutura electrónica de átomos e moléculas pelo método variacional, *i.e.* calculando a energia por minimização da funcional

$$E(\Psi) = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

onde Ψ é uma função de onda arbitrária para o sistema, normalizável no mesmo espaço da função de onda exacta e \hat{H} é

o Hamiltoniano do sistema. A aproximação mais simples corresponde ao método de campo autocoerente monoconfiguracional ou Hartree-Fock (Hartree 1927, Fock 1930). Neste método, também dito da partícula independente, a função de onda Ψ é escrita como um determinante de funções monoeléctricas, orbitais, sendo estas ajustadas até obtenção da melhor função de onda no sentido variacional acima descrito. Em termos físicos, o modelo implica que cada electrão se move, sujeito a restrições impostas pelo princípio da exclusão de Pauli, no campo electrostático médio de todas as outras partículas. Todavia, os movimentos e posições instantâneas de dois ou mais electrões não estão explicitamente correlacionados. Não obstante esta limitação, o método Hartree-Fock pode conduzir a bons resultados em muitas situações, sendo pela sua simplicidade, o método a escolher para sistemas poliatómicos com grande número de átomos.

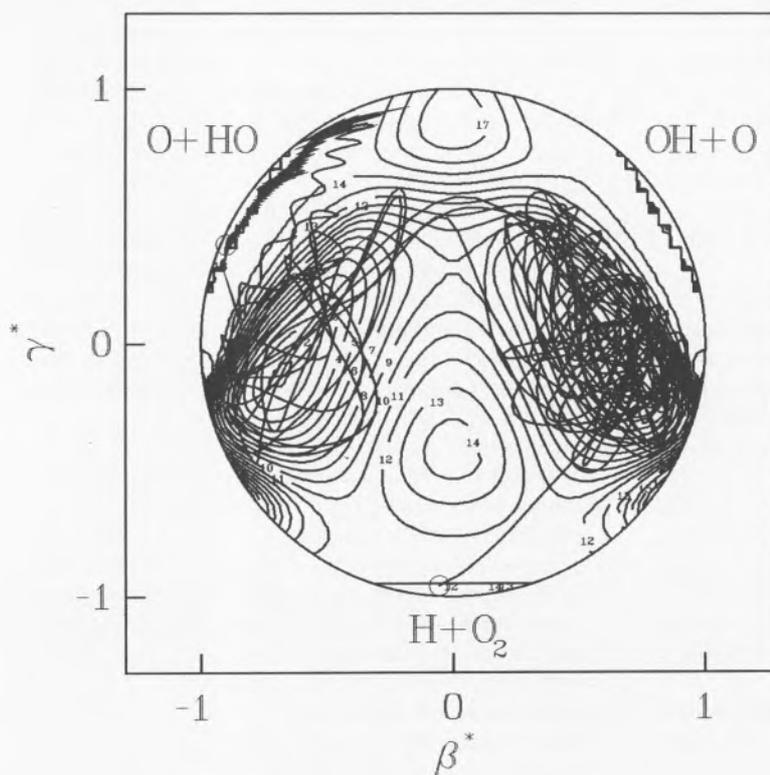
Contudo, a correlação electrónica pode ter um papel fundamental em muitos casos, *e.g.*, no estudo de processos que envolvam a formação

ou ruptura de ligações químicas, não podendo, em geral, ser ignorada. Os métodos mais comumente utilizados para cálculo da energia electrónica que dão conta da correlação fundamentam-se em generalizações da função de onda Hartree-Fock, *i.e.*, consideram a função de onda como uma combinação linear de vários determinantes ou configurações (*e.g.*, Szabo e Ostlund 1982). Se tanto os coeficientes lineares da expansão multideterminante como as próprias orbitais forem optimizados, o método designa-se por método do campo autocoerente multiconfiguracional ou MCSCF, da designação em inglês *multiconfiguration self-consistent-field* (*e.g.*, Shepard 1987). Neste

caso, a função de onda pode comportar tipicamente até 10^5 determinantes usando os meios computacionais mais modernos (Almlöf *et al.* 1988). Por outro lado, se apenas os coeficientes lineares da expansão multideterminante forem optimizados, tem-se o método de interacção de configurações ou CI, de *configuration interaction* (Shavitt 1977), podendo neste caso o número de determinantes atingir 10^7 (Bauschlicher e Taylor 1987). Neste campo, o estado-da-arte combina as metodologias MCSCF e CI, designando-se o correspondente método por interacção de configurações multireferencial ou MR CI, de *multireference CI* (Shavitt 1984, Werner 1987).

Figura 1. Superfície de energia potencial para o estado electrónico fundamental do radical HO_2 . $\beta^* = 3^{1/2}(\sigma_2 - \sigma_3)$ e $\gamma^* = (2\sigma_1 - \sigma_2 - \sigma_3)$, onde $\sigma_1 = R^2/Q$ e $Q = \sum_{i=1}^3 R_i^2$ traduz a soma dos quadrados das separações interatómicas na molécula triatómica. A separação entre contornos sucessivos é de 5 kcal mol⁻¹, correspondendo o primeiro contorno a -54 kcal mol⁻¹. O círculo interior delimita o espaço fisicamente acessível ao movimentos dos núcleos atómicos, sendo unitário o respectivo raio. Mostra-se também, sobreposta, uma trajectória típica relativa ao processo reactivo $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2^* \rightarrow \text{OH} + \text{O}$, indicando-se com pequenos círculos o início e

o fim da integração envolvida. Note-se que, nos canais assintóticos, uma digressão de ida e volta da trajectória ao longo de uma corda do círculo corresponde a uma rotação da molécula diatómica no caso de uma colisão coplanar, correspondendo pequenas oscilações ao longo do referido percurso a vibrações moleculares. Observe-se a formação de um "complexo" duradouro associado à retenção da trajectória (captura) nos poços de potencial referentes às duas estruturas isoméricas do radical hidroperóxido. Observe-se também o facto de a reacção ocorrer após isomerização, *i.e.*, $\text{O}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{HO}_2\text{O}^* \rightarrow \text{O}_3\text{O}^* \text{H} \rightarrow \text{O}_3\text{O} + \text{H}$.



Não obstante os progressos feitos nesta matéria, as aplicações mais recentes (*e.g.*: Schwenke *et al.* 1987, Varandas *et al.* 1987, Bauschlicher *et al.* 1988, Walch *et al.* 1988, Lynch *et al.* 1991) do método MR CI traduzem-se no que comumente se designa por FVCAS-CISD, de *full-valence complete-active-space plus singles and doubles configuration interaction*. Neste caso a função de onda de referência, a partir da qual se constrói a expansão CI, é obtida de um cálculo MC SCF em que a função de onda inclui todos os determinantes obtidos por excitação dos electrões no espaço de valência, seguindo-se-lhe uma expansão CI contendo todas as excitações de um e dois electrões.

Podem assim distinguir-se dois tipos de correlação electrónica (Sinanoglu 1964, Shavitt 1984). A energia de correlação não-dinâmica ou interna define-se como

$$E_{nd} = E_{FVCAS} - E_{HF}$$

e dá conta de degenerescências ou quase-degenerescências entre as orbitais de valência. Por sua vez a fracção da energia de correlação dinâmica calculada ao nível de excitações SD é dada por

$$E_{dcSD} = E_{FVCAS-CISD} - E_{FVCAS}$$

traduzindo a verdadeira correlação dinâmica dos electrões no seu movimento. Devido à elaboração do método e requisitos computacionais, os cálculos FVCAS-CISD estão longe de ser rotina, constituindo o estado-da-arte neste domínio.

O cálculo *ab initio* da superfície de energia potencial molecular requer uma resolução ponto-a-ponto da equação de Schrödinger electrónica (*e.g.*, Szabo e Ostlund 1982). Mesmo quando proveniente de cálculos FVCAS-CISD, a energia potencial calculada requer frequentemente, para utilização em estudos de dinâmica química, a introdução de correcções semiempíricas (Brown e Truhler 1985, Varandas 1989). Tal facto pode atribuir-se a limitações práticas impostas no tamanho da base de funções utilizada para representar as orbitais e no número de determinantes utilizados na expansão CI. O método DMBE-SEC, de *double many-body expansion scaled external correlation* (Varandas 1989),

revela-se de grande utilidade para este efeito, corrigindo a energia FVCAS-CISD de acordo com

$$E_{dc}^{(n)} = \frac{E_{FVCAS-CISD}^{(n)} - E_{FVCAS}^{(n)}}{g^{(n)}}$$

onde $g^{(n)}$ representa um parâmetro empírico determinado a partir da condição de que os valores calculado e experimental da energia de dissociação sejam coincidentes para qualquer fragmento a n -corpos que resulte da expansão multicorpos (Murrell *et al.* 1984) da energia molecular. Os termos $E_{dc}^{(n)}$ são definidos através da expansão dupla multicorpos, ou DMBE (de *double many-body expansion*) (Varandas 1985a, 1987a, 1987b, 1988b, 1989, 1990, 1992a, 1992b)

$$E(\mathbf{R}^N) = \sum_{i=1}^N \sum_{\mathbf{R}^i \subset \mathbf{R}^N} [E_{FVCAS}^{(i)}(\mathbf{R}^i) + E_{dc}^{(i)}(\mathbf{R}^i)]$$

onde N representa o número total de átomos, \mathbf{R}^i representa qualquer conjunto de $[i(i-1)/2]$ coordenadas referentes a i átomos, sendo portanto um subconjunto de $\mathbf{R}^N = [R_1, R_2, \dots, R_{N(N-1)/2}]$ e o somatório abrange implicitamente todos os possíveis subconjuntos.

Igualmente imprescindível para os estudos de dinâmica é dispor de uma forma funcional fiável que represente de modo contínuo a energia potencial e o seu gradiente em todo o espaço configuracional da molécula (Varandas 1988b, Schatz 1990). Assim são de extrema importância os métodos para cálculo semiempírico e representação da superfície de energia potencial em todo o espaço configuracional da espécie molecular intermediária (Murrell *et al.* 1984). Trata-se, genericamente, de uma função representável num espaço $(3N-5)$ -dimensional: uma coordenada para a energia e $(3N-6)$ coordenadas espaciais. Neste domínio, adquiriu o grupo que dirijo experiência considerável, granjeando de popularidade um método por nós proposto – método DMBE – baseado numa representação analítica dos vários termos que surgem na expansão dupla multicorpos acima apresentada (Varandas 1988b, 1992b).

De acordo com o método DMBE, uma função potencial univalorada exprime-se como a soma de uma energia do tipo FVCAS (usualmente designada *extended Hartree-Fock*, EHF) e a energia de correlação dinâmica. Tanto

a energia Hartree-Fock generalizada como a da correlação dinâmica assumem a forma de uma expansão multicorpos, definindo-se energia a n -corpos como a componente residual da energia total após remoção de todos os termos de ordem inferior na referida expansão. Em princípio, os termos a n -corpos na expansão da energia Hartree-Fock generalizada são obtidos por cálculo *ab initio* enquanto que os da correlação dinâmica são estimados semiempíricamente a partir dos coeficientes na expansão $C_m R^{-m}$ para a energia de dispersão dos vários canais assintóticos. Refira-se que, em geral, os coeficientes C_m variam com a orientação relativa e a geometria intramolecular dos fragmentos, tendo alguns progressos no seu cálculo sido por nós relatados recentemente (Varandas e Matias 1988, Matias e Varandas 1989, Varandas 1992a, 1992b). Uma metodologia semelhante pode ser usada para introduzir uma descrição assintótica correcta nas componentes de longo alcance da energia Hartree-Fock generalizada que variam como potências inversas da separação interatómica (Varandas 1988b). Note-se, finalmente, que funções de energia potencial multivaloradas são necessárias sempre que exista mais do que um canal de dissociação para um dado modo de fragmentação molecular, sendo representadas por valores próprios de matrizes.

O método DMBE tem-se revelado uma estratégia útil para todos os sistemas triatómicos a que foi aplicado, incluindo moléculas quimicamente estáveis e moléculas de van der Waals, sendo também promissores alguns resultados obtidos para sistemas tetra-atômicos. A Tabela 1 mostra a variedade de sistemas estudados até ao presente por este método. Refira-se que, dada a sua importância como protótipo em química teórica, o potencial DMBE para o estado duplo fundamental do sistema H_3 tem merecido particular atenção e uso pelos dinamicistas (*e.g.*: Blais *et al.* 1989, Hancock *et al.* 1989, Manolopoulos 1990, Auerbach 1990, Zhao *et al.* 1990, Kress *et al.* 1990, Borman 1990, Miller 1990).

DINÂMICA MOLECULAR

Cálculo *ab initio* do espectro rotovibracional de moléculas triatómicas

Os estudos rotovibracionais teóricos são de grande importância na interpretação e previsão dos fenómenos de interacção da radiação com as moléculas. Conhecida a superfície de energia potencial molecular, os níveis de energia rotovibracional podem ser obtidos por resolução da correspondente equação de Schrödinger nuclear. Utilizando as funções de onda para esses níveis energéticos e a mecânica estatística, pode ainda calcular-se o espectro teórico para uma dada temperatura.

Sistemas	Ref.
Triatómicos	
H ₃ (² A')	Varandas <i>et al.</i> 1987
H ₃ (⁴ A')	Varandas <i>et al.</i> 1992b
Li ₃ (² A')	Morais <i>et al.</i> 1990
FH ₂ (² A')	Lynch <i>et al.</i> 1991
HO ₂ (² A')	Pastrana <i>et al.</i> 1990
O ₃ (¹ A')	Varandas e Pais 1988
HeH ₂ (¹ A')	Varandas e Brandão 1986
Tetra-atómicos	
O ₄ (³ A)	Varandas e Pais 1991

Tabela 1. Superfícies de energia potencial estudadas pelo método DMBE.

Se, ao invés, for conhecido o espectro rotovibracional, pode ser utilizado um processo interactivo de ajuste (Carter *et al.* 1982) para a partir dele se calibrar a superfície de energia potencial na região próximo à geometria de equilíbrio. O uso neste processo de um modelo realista do tipo DMBE poderá conduzir a potenciais que possam servir não apenas para prever outros níveis rotovibracionais ainda não observados como ainda para outros estudos dinâmicos como os que se descrevem no parágrafo seguinte. Em particular, este procedimento pode revelar-se de grande utilidade para refinamento dos potenciais DMBE recentemente publicados para as moléculas de O₃ (Varandas e Pais 1988) e HO₂ (Pastrana *et al.* 1990), para os quais os valores calculados dos níveis vibracionais mostraram desvios significativos (até algumas dezenas de cm⁻¹) quando confrontados com os correspondentes valores experimentais (Varandas e Rodrigues 1990). Para o cálculo variacional dos níveis vibracionais utilizou-se o método proposto por Sutcliffe e Tennyson (1986), tendo-se adaptado para o efeito

o programa desenvolvido por Tennyson (1986). Cálculos de funções de onda e níveis vibracionais para o sistema HO₂, utilizando potenciais DMBE, foram igualmente efectuados por outros autores (Adhikari e Hamilton 1990, Bowman 1991, Adhikari e Hamilton 1991, Chapman *et al.* 1992).

Estudos de reacções químicas elementares

A compreensão detalhada dos fenómenos de colisão à escala atômico-molecular que conduzem a reacção química assume um papel fundamental no desenvolvimento de *lasers*, em química da atmosfera e interestelar e na compreensão dos processos de combustão (Levine e Bernstein 1987).

Do ponto de vista teórico, o estudo de uma colisão molecular (reactiva ou não-reactiva) envolve duas etapas fundamentais: (i) cálculo da hipersuperfície de energia potencial que rege o movimento dos núcleos; (ii) resolução das equações do movimento destes últimos sob a acção do potencial calculado em (i). Qualquer destas etapas representa por si só um problema computacional de grande complexidade só eficientemente resolúvel com recurso aos melhores meios computacionais hoje disponíveis.

Obtido o potencial molecular, fica aberta a possibilidade da simulação computacional e cálculo [recorrendo à mecânica quântica ou, na maioria dos casos, à mecânica clássica (*e.g.*: Porter e Raff 1976, Truhlar e Muckerman 1979)] de todos os parâmetros de reactividade, mesmo aqueles que no estado actual do conhecimento não tenham possibilidade de medição experimental (Levine e Bernstein 1987). A Tabela 2 sumaria algumas das reacções elementares estudadas utilizando potenciais DMBE, bem como os métodos utilizados: QCT (*e.g.*, Truhlar e Muckerman 1979), QCT-IEQMT (Varandas e Marques 1992), VTST (*e.g.*, Truhlar *et al.* 1985) e CES+R (Varandas 1988, 1991). Note-se que QCT designa o método das trajectórias quasiclássicas (*QuasiClassical Trajectory*), enquanto QCT-IEQMT (*quasiclassical trajectory internal-energy quantum mechanical threshold*) representa uma variante deste método que corrige de modo aproximado o facto de energias de ponto zero não serem conservadas em mecânica clássica. Por sua vez, VTST

designa teoria variacional do estado de transição (*Variational Transition State Theory*), enquanto que CES+R significa teoria de captura incluindo recruzamento (*Capture-Energy-Sudden Plus Recrossing*). Nas subsecções seguintes analisaremos algumas daquelas reacções, cujo estudo poderá ter implicações sociais (ambientais e/ou tecnológicas), além do interesse científico *per se*.

A reacção H + O₂ → OH + O

Um sistema que tem merecido particular atenção nos últimos anos é o radical hidropéroxilo no seu estado electrónico fundamental, HO₂(²A"). Trata-se de uma molécula estável, que corresponde ao intermediário da reacção H+O₂→OH+O (os reagentes e produtos encontram-se no estado electrónico fundamental), hoje considerada como a mais importante em combustão. Daí a importância que tem merecido o estudo teórico (*e.g.*: Quintales *et al.* 1988, Davidson e Nyman 1990, Graff e Wagner 1990, Wagner e Graff 1990, Varandas *et al.* 1992a) e experimental (*e.g.*: Shin e Michael 1991, Du e Hessler 1992) desta reacção e sua inversa, sendo de realçar o facto de vários organismos directa ou indirectamente ligados à NASA nela estarem interessados (Walch *et al.* 1988).

Reacção	Método
O + OH → O ₂ + H	QCT, QCT-IEQMT, VTST, CES+R
H + O ₂ → OH + O	QCT
O + O ₃ → 2O ₂	QCT
Li + Li ₂ → Li ₂ + Li	QCT

Tabela 2. Reacções bimoleculares em curso utilizando potenciais DMBE.

A Figura 1 mostra¹ a superfície de energia potencial DMBE para o radical hidropéroxilo sob a forma de um diagrama triangular optimizado que utiliza coordenadas hiperesféricas (Varandas 1987c, 1987d). Usando esta superfície de energia potencial (Varandas *et al.* 1988, Pastrana *et al.*

¹A capa deste Boletim contém uma versão a cores desta Figura na qual o espaço físico coincide com a "lua" a amarelo. Por sua vez, a trajectória sobreposta está representada a vermelho, com pontos a verde indicando o início e o fim da mesma.

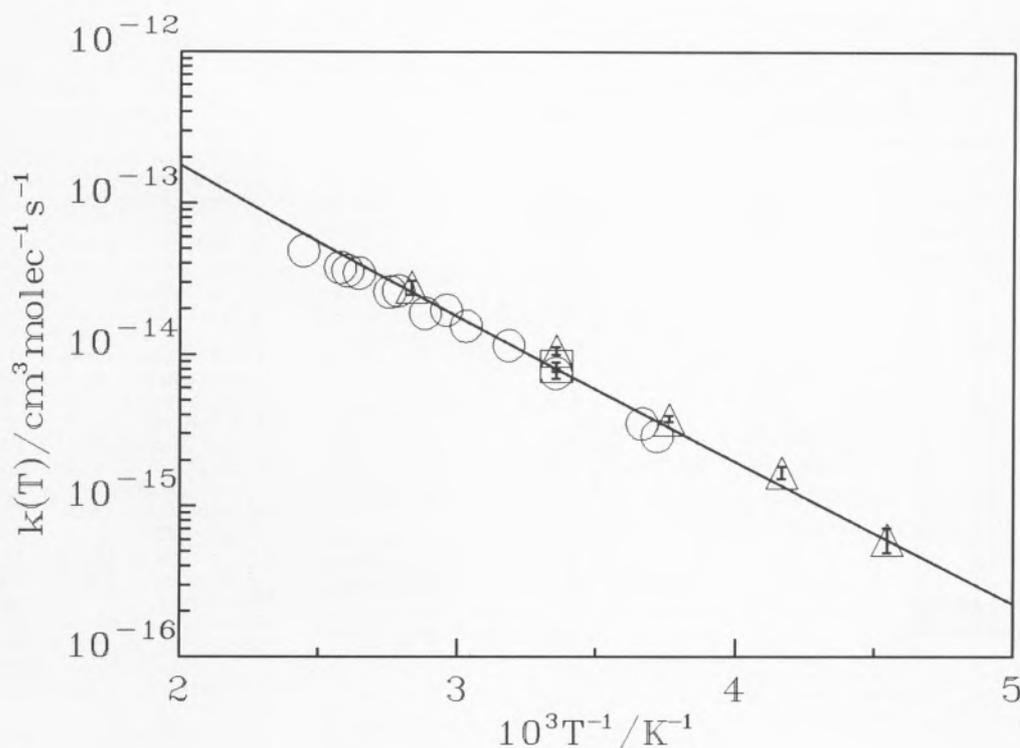


Figura 2. Coeficientes de velocidade termalizados para a reacção $O + O_3 \rightarrow 2O_2$. Comparam-se os resultados teóricos (linha) com valores experimentais comumente aceites: círculos (McCrumb e Kaufman 1972); triângulos (Davis *et al.* 1973); quadrado (West *et al.* 1978).

1990), foram efectuados cálculos de trajectórias quasiclassicas (encontra-se, sobreposta, na Figura 1 uma trajectória reactiva típica) com vista à determinação dos coeficientes de velocidade da reacção supracitada e sua inversa, bem como da respectiva constante de equilíbrio (Varandas *et al.* 1992a). Foi também efectuado um estudo detalhado da dinâmica estado-a-estado da citada reacção no regime de temperaturas baixas e ultra-baixas (Varandas e Marques 1992). Foram igualmente iniciados cálculos de dinâmica quântica "estado-da-arte", constituindo porventura o primeiro sistema ligante a ser estudado por tais métodos (Pack 1990).

A reacção $O + O_3 \rightarrow 2O_2$

Na química da atmosfera assumem principal importância as

reacções envolvidas no chamado ciclo de depleção do ozono, $O_3(^1A_1)$. Um exemplo importante é a reacção $O + O_3 \rightarrow 2O_2$ cujo estudo teórico requer o conhecimento da superfície de energia potencial para o estado tripleto fundamental do sistema O_4 . Além do número de sistemas tetra-atômicos até hoje estudados ter sido muito reduzido (dadas as exigências associadas ao conhecimento da função de energia potencial que depende de 6 coordenadas configuracionais), é de salientar o facto de, pela primeira vez, se ter conseguido com sucesso a modelização de não apenas das propriedades cinéticas (referentes ao coeficiente de velocidade termalizado da reacção $O + O_3 \rightarrow 2O_2$, ilustrado na Figura 2 sob a forma de um diagrama de Arrhenius) mas também das propriedades de estado (segundo coeficiente de virial) do oxigénio molecular gasoso (Varandas e Pais 1991).

Os sistemas halogénio-hidrogénio

Os sistemas halogénio-hidrogénio revestem-se de grande importância no domínio dos *lasers*

químicos (*e.g.*, Levine e Bernstein 1987), o que explica o elevado número de estudos teóricos e experimentais efectuados para as reacções de abstracção, (i) $X + H_2 \rightarrow XH + H$, e troca, (ii) $H + XH \rightarrow HX + H$. Dispondo de um potencial DMBE recentemente calculado (Lynch *et al.* 1991) para o sistema FH_2 , provavelmente a mais realista existente para esta espécie, torna-se agora possível efectuar estudos dinâmicos rigorosos tanto para as reacções de abstracção como de troca acima indicadas.

EPÍLOGO

Apresentei neste trabalho uma breve síntese de estudos teórico/computacionais sobre energética e dinâmica das reacções químicas elementares efectuados nos últimos anos pelo autor e colaboradores, enquadrando-os numa perspectiva mais geral dos progressos ocorridos em estrutura e dinâmica molecular. Inevitavelmente, a presente síntese tem limitações importantes que o leitor pode minimizar consultando a literatura citada, nomeadamente Almlöf *et al.*

(1988) e Clementi (1990). Contudo, deverá ter ficado claro que os estudos teórico-computacionais aqui discutidos e outros análogos podem revelar-se de grande importância prática, e.g., no desenvolvimento e controle de *lasers* e na compreensão e quantificação das reações químicas elementares que possibilitam uma melhoria na eficiência dos processos de combustão ou uma diminuição dos efeitos de poluição atmosférica.

Agradecimentos

O autor agradece o apoio recebido do Instituto Nacional de Investigação Científica (INIC) e da Fundação Nacional para o Desenvolvimento dos Meios de Cálculo Científico - FCCN.

LITERATURA CITADA

- Adhikari, N e Hamilton, I., "Vibrational spacings for HO_2 and vibrational splittings for hydrogen atom exchange", *J. Chem. Phys.* 93, 6111-6112, 1990.
- Adhikari, N e Hamilton, I., "Vibrational splittings for hydrogen atom exchange in HO_2 : the effect of O ... O displacement on vibration", *J. Phys. Chem.* 95, 6470-6473, 1991.
- Almlöf, I., Truhlar, D.G. e Lybrand, T.P., "Supercomputer chemistry: structure, dynamics, and biochemical applications", University of Minnesota Supercomputer Institute, UMSI 88/69.
- Auerbach, S.M., Zhang, J.Z.H. e Miller, W.H., "Comparison of quantum scattering calculations for the $\text{H}+\text{H}_2$ reaction using the LSTH and DMBE potentials", *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 86, 1701-1704, 1990.
- Bauschlicher, C.W., Jr. e Taylor, P., "Full CI benchmark calculations on CH_3 ", *J. Chem. Phys.* 86, 5600-5602, 1987.
- Bauschlicher Jr., C.W., Walch, S.P., Langhoff, S.R., Taylor, P.R. e Yaffe, R.L., "Theoretical studies of the potential surface for the $\text{F}+\text{H}_2 \rightarrow \text{HF}+\text{H}$ reaction", *J. Chem. Phys.* 88, 1743-1751, 1988.
- Blais, N.C., Zhao, M., Mladnovic, M., Truhlar, D.G., Schwenke, D., Sun, Y. e Kouri, D.J., "Comparison of quasiclassical trajectory calculations to accurate quantum mechanics for state-to-state partial cross sections at low angular momentum for the reaction $\text{D}+\text{H}_2 \rightarrow \text{HD}+\text{H}$ ", *J. Chem. Phys.*, 91, 1038-1042, 1989.
- Borman, S., "Theory, experiment team up to probe simplest reaction", *C&EN*, June 4, 32-37, 1990.
- Born, M. e Oppenheimer, J., "Zur Quantentheorie der Molekeln", *Ann. Physik* 84, 457-484, 1927.
- Bowman, J., "Vibrational splittings and wavefunctions of high energy localized and floppy states of non-rotating HO_2 ", *Chem. Phys. Lett.* 180, 249-256, 1991.
- Braga, J. e Varandas, A.J.C., "Quantum and semiclassical analysis of spinexchange cross sections for the alkali diatomic molecules", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 23, 3113-3122, 1990.
- Brown, F.B. e Truhlar, D.G., "A new semi-empirical method of correcting largescale configuration interaction calculations for incomplete dynamic correlation of the electrons", *Chem. Phys. Lett.* 117, 307-313, 1985.
- Brumer, P., "Intramolecular energy transfer: theories for the onset of statistical behavior", *Adv. Chem. Phys.* 47, 201-238, 1981.
- Carter, S., Mills, I.S., Murrell, J.N. e Varandas, A.J.C., "Analytical potentials for triatomic molecules. IX. The prediction of anharmonic force constants from potential energy surfaces based on harmonic force fields and dissociation energies for SO_2 and O_3 ", *Molec. Phys.* 45, 1053-1066, 1982.
- Castro, C.A.N., Fareleira, J.M.N.A., Matias, P.M., Ramires, M.L.V., Pais, A.A.C.C. e Varandas, A.J.C., "Thermophysical properties of alkali metal vapours. I. Theoretical calculation of the properties of monoatomic systems", *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 94, 53-59, 1990.
- Chapman, D., Bowman, J. e Gadzy, B., "Time dependence of OH overtone relaxation in the hydroperoxyl radical", *J. Chem. Phys.* 96, 1919-1930, 1992.
- Clementi, E., Editor, "Modern Techniques in Computational Chemistry: MOTEC90", ESCOM Science Publishers B.V., 1990.
- Crawford Jr., B., "Chemical analysis by infrared", *Scientific American*, Outubro 1953, pp. 42-48.
- Davidsson, J. e Nyman, G., "A low-energy quasiclassical trajectory study of the $\text{O}(^3\text{P})+\text{OH}(^2\text{T}) \rightarrow \text{O}_2(^3\Sigma^-) + \text{H}(^2\text{S})$. I. Cross sections and reaction dynamics", *J. Chem. Phys.* 92, 2407-2414, 1990.
- Davis, D.L., Wong, W. e Lephardt, J., "A laser flash photolysis-resonance fluorescence kinetic study: reaction of $\text{O}(^3\text{P})$ with O_3 ", *Chem. Phys. Lett.* 22, 273-278, 1973.
- Dias da Silva, J., Brandão, J. e Varandas, A.J.C., "Accurate diatomic curves for Ne_2 , Ar_2 , Kr_2 , and Xe_2 from the extended Hartree-Fock approximate correlation energy model", *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 2 85, 1851-1875, 1989.
- Dirac, P.A.M., "On the theory of quantum mechanics", *Proc. Roy. Soc. London A112*, 661-677, 1926.
- Du, H. e Hessler, J.P., "Rate coefficient for the reaction $\text{H}+\text{O}_2 \rightarrow \text{OH}+\text{O}$: results at high temperatures, 2000 to 5300K", *J. Chem. Phys.* 96, 1077-1092, 1992.
- Fock, V.A., "Näherungsmethode zur Lösung des Quantenmechanischen Mehrkörperproblems", *Z. Physik* 61, 126-148, 1930.
- Ford, J., "The transition from analytical dynamics to statistical mechanics", *Adv. Chem. Phys.* 24, 155-183, 1973.
- Graff, M.M. e Wagner, A.F., "Theoretical studies of fine-structure effects and long-range forces: potential-energysurfaces and reactivity of $\text{O}(^3\text{P})+\text{OH}(^2\text{T})$ ", *J. Chem. Phys.* 92, 2423-2439, 1990.
- Hancock, G.C., Mead, C.A., Truhlar, D.G. e Varandas, A.J.C., "Reaction rates of $\text{H}(\text{H}_2)$, $\text{D}(\text{H}_2)$, and $\text{H}(\text{D}_2)$ van der Waals molecules and the threshold behavior of the bimolecular gas-phase rate coefficient", *J. Chem. Phys.* 91, 3492-3503, 1989.
- Hartree, D.R., "The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. I. Theory and methods", *Proc. Camb. Phil. Soc.* 24, 89-110, 1928.
- Heisenberg, W., "Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantentheorie", *Z. Physik* 38, 411-426, 1926a.
- Heisenberg, W., "Über die Spectra von Atomsystemen mit zwei Elektronen", *Z. Physik* 39, 499-518, 1926b.
- Heitler, W. e London, F., "Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik", *Z. Physik* 44, 455-472, 1927.
- Hirst, D.M., *Potential Energy Surfaces*, Taylor & Francis: London, 1985.
- Kress, J.D., Bačić, Z., Parker, G.A. e Pack, R.T., "Quantum reactive scattering in three dimensions using hyperspherical (APH) coordinates. 5. Comparison between two accurate potential energy surfaces for $\text{H}+\text{H}_2$ and $\text{D}+\text{H}_2$ ", *J. Phys. Chem.* 94, 8055-8058, 1990.
- Levine, R.D. e Bernstein, R.B., *Molecular Reaction Dynamics and Chemical Reactivity*, Clarendon Press: Oxford, 1987.
- Lynch, G.C., Steckler, R., Schwenke, D.W., Varandas, A.J.C., Truhlar, D.G. e Garrett, B.C., "Use of scaled-external correlation, a double many-body expansion, and variational transition state theory to calibrate a potential energy surface for FH_2 ", *J. Chem. Phys.*, 94, 7136-7149, 1991.
- Manolopoulos, D.E. e Wyatt, R.E., " $\text{H}+\text{H}_2(0,0) \rightarrow \text{H}(v',j') + \text{H}$ integral cross sections on the double many-body expansion potential energy surface", *J. Chem. Phys.* 92, 810-812, 1990.
- Matias, M.A. e A.J.C. Varandas, "Atom-molecule dispersion energy coefficients and their dependence on the intramolecular coordinate: the $\text{A}-\text{H}_2$ systems", *Molec. Phys.* 90, 623-644, 1990.
- McCrumb, J.L. e Kaufman, F., "Kinetics of the $\text{O} + \text{O}_2$ reaction", *J. Chem. Phys.* 57, 1270-1276, 1972.
- Miller, W.H., "Recent advances in quantum mechanical reactive scattering theory, including comparison of recent experiments with rigorous calculations of 'state to state' cross sections for the reaction $\text{H/D} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2/\text{HD} + \text{H}$ reactions", *Annu. Rev. Phys. Chem.* 41, 245-281, 1990.
- Morais, V.M.F. e Varandas, A.J.C., "On the third virial coefficient of the alkali metal vapours", *Chem. Phys. Lett.* 113, 192-196, 1985.
- Morais, V.M.F., Pais, A.A.C.C. e Varandas, A.J.C., "A new potential energy surface and dynamics study of the $\text{Li}+\text{Li}_2 \rightarrow \text{Li}_2 + \text{Li}$ exchange reaction", *Third European Conference on Atomic and Molecular Physics*, Conference Abstracts, Bordeaux, 1989, p. 438.
- Morais, V.M.F. e Varandas, A.J.C., "Exponentiating trajectories on a realistic potential energy surface for Na_3 ", *J. Phys. Chem.*, 96, 5704-5709, 1992.
- Murrell, J.N., Carter, S., Farantos, S.C., Huxley, P. e Varandas, A.J.C., *Molecular Potential Energy Functions*, Wiley: Chichester, 1984.
- Noid, D.W., Koszykowski, M.L. e Marcus, R., "Quasiperiodic and stochastic behavior in molecules", *Ann. Rev. Phys. Chem.* 32, 267-309, 1981.
- Nyman G. e Davidsson, J., "A low-energy quasiclassical trajectory study of $\text{O}(^3\text{P})+\text{OH}(^2\text{T}) \rightarrow \text{O}_2(^3\Sigma^-) + \text{H}(^2\text{S})$. II. Rate constants and recrossing, zeropoint energy effects", *J. Chem. Phys.* 92, 2415-2422, 1990.
- Pack, R.T., 1990, comunicação privada.
- Pastrana, M.R., Quintales, L.A.M., Brandão, J. e Varandas, A.J.C., "Recalibration of a single-valued double many-body expansion potential energy surface for ground-state HO_2 and dynamics calculations for the $\text{O}+\text{OH} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$ reaction", *J. Phys. Chem.* 94, 8073-8080, 1990.
- Pauli, W., "Über den Zusammensetzung des Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur des Spektren", *Z. Physik* 31, 765-783, 1925.

- Penrose, O., *Foundations of Statistical Mechanics*, Pergamon: Oxford, 1970.
- Percival, I. e Richards, D., *Introduction to Dynamics*, Cambridge University Press: Cambridge, 1982.
- Porter, R.N. e Raff, L.M., "Classical trajectory methods in molecular collisions", in *Dynamics of Molecular Collisions*, Miller, W.H., Editor, *Mod. Theoret. Chem.* 1B, 1-32, 1976.
- Quintales, L.A.M., Varandas, A.J.C. e Alvarinho, J.M., "Quasiclassical trajectory calculations of the thermal rate coefficient for the $O + OH \rightarrow O_2 + H$ reaction on realistic double many-body expansion potential energy surfaces for ground-state HO_2 ", *J. Phys. Chem.* 92, 4552-4555, 1988.
- Rice, S.A., "An overview of the dynamics of intramolecular transfer of vibrational energy", *Adv. Chem. Phys.* 47, 117-200, 1981.
- Rutherford, E., "The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom", *Phil. Mag.* 21, 669-688, 1911.
- Schatz, G.C., "The analytical representation of electronic potential-energy surfaces", *Rev. Mod. Phys.* 61, 669-688, 1989.
- Schrödinger, E., "Quantisierung als Eigenwertproblem. I.", *Ann. Physik* 79, 361-376, 1925.
- Schrödinger, E., "Quantisierung als Eigenwertproblem. II.", *Ann. Physik* 81, 109-139, 1926.
- Schuster, H.G., *Deterministic Chaos*, VCH Publishers: Weinheim, 1988.
- Schwenke, D.W., Steckler, R., Brown, F.B. e Truhlar, D.G., "Estimation of higher-order correlation effects on the potential energy surface for the $F + H_2$ reaction in the saddle point vicinity", *J. Chem. Phys.* 86, 2443-2444, 1987.
- Shavitt, I., "The treatment of electron correlation: where do we go from here?", in *Advanced Theories and Computational Approaches to the Electronic Structure of Molecules*, Dykstra, C.E., Editor, Reidel: Dordrecht, 1984, pp. 185-196.
- Shavitt, I., "The method of configuration interaction", in *Methods of Electronic Structure Theory*, Schaefer III, H.F., Editor, *Mod. Theoret. Chem.* 3, 189-275, 1977.
- Shepard, R., "The multiconfiguration-self-consistent-field method", *Adv. Chem. Phys.* 69, 63-200, 1987.
- Shin, K.S. e Michael, J.V., "Rate constants for the reactions $H + O_2 \rightarrow OH + O$ and $D + O_2 \rightarrow OD + O$ over the temperature range 1085-2278 K by the laser photolysis-shock tube technique", *J. Chem. Phys.* 95, 262-273, 1991.
- Sinanculu, O., "Many-electron theory of atoms, molecules and their interactions", *Adv. Chem. Phys.* 6, 315-412, 1964.
- Sutcliffe, B.T. e Tennyson, J., "A generalized approach to the calculation of rovibrational spectra of triatomic molecules", *Mol. Phys.* 58, 1053-1066, 1986.
- Szabo, A. e Ostlund, N.S., *Modern Quantum Chemistry*, MacMillan Publishing Co.: New York, 1982.
- Tabor, M., "The onset of chaotic motion in dynamical systems", *Adv. Chem. Phys.* 46, 73-151, 1981.
- Tennyson, J.T., "Triatom, select and rotlev - for the calculation of the rovibrational levels of triatomic molecules", *Comp. Phys. Comm.*, 42, 257-270, 1986.
- Truhlar, D.G. e Muckerman, J.T., "Reactive scattering cross sections III: quasiclassical and semiclassical methods", in *Atom-molecule Collision Theory*, R. Bernstein, Editor, Plenum Press: New York, 1979, pp. 505-566.
- Truhlar, D.G., Isaacson, A.D. e Garrett, B.C., "Generalized transition state theory" in *Theory of Chemical Reaction Dynamics*, M. Baer, Editor, CRC Press: Boca Raton, FL 1985, pp. 65-137.
- Varandas, A.J.C., "A general approach to the potential energy functions of small polyatomic systems: molecules and van der Waals molecules", *J. Mol. Struct. Theochem* 120, 401-424, 1985a.
- Varandas, A.J.C., "Sobre os fundamentos da mecânica estatística: a transição entre a dinâmica analítica e a dinâmica caótica", *Bol. Soc. Port. Quim.* 22, 25-38, 1985b.
- Varandas, A.J.C. e Brandão, J., "A double many-body expansion of molecular potential energy functions. II. Application to selected AB_2 -type van der Waals molecules and more stable molecules: the ground-state surfaces of HeH_2 , $HeLi_2$, and HO_2 ", *Molec. Phys.* 57, 387-414, 1986.
- Varandas, A.J.C., Brown, F.B., Mead, C.A., Truhlar, D.G. e Blais, N.C., "A double many-body expansion of the two lowest-energy potential surfaces and non-adiabatic coupling for H_3 ", *J. Chem. Phys.* 86, 6258-6269, 1987.
- Varandas, A.J.C., "Non-bonding atom-diatom potentials via a double many-body expansion method", in *Structure and Dynamics of Weakly Bound Complexes*, Weber, A., Editor, Reidel: 1987a, pp. 357-371.
- Varandas, A.J.C., "The double many-body expansion of potential energy surfaces from interacting 'S atoms", *Int. J. Quant. Chem.* 32, 563-575, 1987b.
- Varandas, A.J.C., "A useful triangular plot of triatomic potential energy surfaces", *Chem. Phys. Lett.* 138, 455-461, 1987c.
- Varandas, A.J.C., *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 84, 419-424, 1987d.
- Varandas, A.J.C., Brandão, J. e Quintales, L.A.M., "A realistic $HO_2(X^2A)$ potential energy surface from the double many-body expansion method", *J. Phys. Chem.* 92, 3732-3742, 1988.
- Varandas, A.J.C. e Pais, A.A.C.C., "A realistic double many-body expansion (DMBE) potential energy surface for ground-state O_3 from a multiproperty fit to *ab initio* calculations, and to experimental spectroscopic, inelastic scattering, and kinetic thermal rate data", *Molec. Phys.* 65, 843-860, 1988.
- Varandas, A.J.C., "Double many-body expansion of molecular potential energy functions and the role of long range forces in chemical reactions", *J. Mol. Struct. Theochem* 166, 59-74, 1988a.
- Varandas, A.J.C., "Intermolecular and intramolecular potentials: topographical aspects, calculation, and functional representation via a double many-body expansion method", *Adv. Chem. Phys.* 74, 255-338, 1988b.
- Varandas, A.J.C. e Matias, M.A., "The dependence of the C_6 atom-diatom dispersion energy coefficient on the diatomic vibrational coordinate: A-H interactions", *Chem. Phys. Lett.* 148, 149-157, 1988.
- Varandas, A.J.C., "A semiempirical method for correcting configuration interaction potential energy surfaces", *J. Chem. Phys.* 89, 4379-4391, 1989.
- Varandas, A.J.C., "Scaling of external correlation and analytical representation of electronic potential energy surfaces: the general approach of the double many-body expansion", in *Trends in Atomic and Molecular Physics*, M. Yañez, Editor, Universidad Autonoma de Madrid, 1990, pp. 113-136.
- Varandas, A.J.C., "Capture-energy-sudden plus recrossing model for atom-diatom reactions dominated by long range forces. Application to $O + OH$ ", in *Conferencias Plenárias de la XXIII Reunión Bienal de Química*, A. San Feliciano, M. Grande e J. Casado, Editores, R.S.E.Q., Universidade de Salamanca, 1991, pp. 321-345.
- Varandas, A.J.C. e Pais, A.A.C.C., "Double many-body expansion potential energy surface for $O_3(^1A)$, dynamics of the $O(^3P) + O_3(^1A)$ reaction, and second virial coefficients of molecular oxygen", in *Computational and Theoretical Models for Organic Chemistry*, S.J. Formosinho, I.G. Czismadia and L.G. Arnaut, Editores, Kluwer: Dordrecht, 1991, pp. 55-78.
- Varandas, A.J.C. e Silva, J.D., "Potential model for diatomic molecules including the united-atom limit and its use for a multiproperty fit for argon", *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 88, 941-954, 1992.
- Varandas, A.J.C., Brandão, J. e Pastrana, M.R., "Quasiclassical trajectory calculations of the thermal rate coefficients for the reactions $H(D) + O_2 \rightarrow OH(D) + O$ and $O + OH(D) \rightarrow O_2 + H(D)$ as a function of temperature", *J. Chem. Phys.* 96, 5137-5150, 1992a.
- Varandas, A.J.C., "The calculation of molecular dispersion coefficients and modelling of dynamical correlation energy: application to H_3 ", in *Dynamical Processes in Molecular Physics*, G. Delgado-Barrio, Editor, Adam-Hilger, 1992a, em impressão.
- Varandas, A.J.C., "A new formulation of three-body dynamical correlation energy for explicit potential functions", *Chem. Phys. Lett.* 194, 333-340, 1992b.
- Varandas, A.J.C. e Marques, J.M.C., "A detailed state-to-state low-energy dynamics study of the reaction $O(^3P) + OH(^2\Pi) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-) + H(^2S)$ using a quasiclassical trajectory-internal energy quantum mechanical threshold (QCTIEQMT) method", *J. Chem. Phys.*, 1992, em impressão.
- Varandas, A.J.C., Rodrigues, A.M.A. e Matias, M.A., "First principles calculation of the potential-energy surface for the lowest-quartet state of H_3 and modelling by the double many-body expansion method", 1992b, para publicação.
- Varandas, A.J.C. e Rodrigues, S.P.J., trabalho não publicado.
- Wagner, A.F. e Graff, M.M., "Theoretical studies of fine-structure effects and long-range forces: approximating the reactive surface of $O(^3P) + OH(^2\Pi)$ ", *Chem. Phys. Lett.* 174, 287-293, 1990.
- Walch, S.P., Rohlfing, C.M., Melius, C.F. e Bauschlicher Jr., C.W., "Theoretical characterization of the minimum energy path for the reaction $H + O_2 \rightarrow HO_2 \rightarrow OH + O$ ", *J. Chem. Phys.* 88, 6273-6281, 1988.
- Werner, H.-J., "Matrix-formulated direct multiconfiguration self-consistent field method and multiconfiguration reference configuration-interaction methods", *Adv. Chem. Phys.* 69, 1-62, 1987.
- West Jr., G.A., Weston, R.E. e Flynn, G.W., "The influence of reactant vibrational excitation on the $O(^3P) + O_2$ bimolecular reaction rate", *Chem. Phys. Lett.* 56, 429-433, 1978.
- Zhao, M., Truhlar, D.G., Schwenke, D., e Kouri, D.J., "Effect of rotational excitation on state-to-state cross sections: $D + H_2 \rightarrow HD + H$ ", *J. Phys. Chem.* 94, 7074-7090, 1990.

Geocentrismo, Antropocentrismo e Heliocentrismo

A. M. AMORIM DA COSTA *

Confrontados com o acaso que reina no interior da matéria, os cientistas tiveram de proceder ao estabelecimento de uma nova visão da realidade, mas não ficaram minimamente cerceados, nem impossibilitados, no prosseguimento da sua missão científica.

"A verdadeira Física é a que conseguir integrar o Homem total numa representação coerente".

Teilhard de Chardin

1. DEUS, O HOMEM E O UNIVERSO

Toda a actividade científica aponta no sentido da humanização da Terra. O homem, pelo progresso técnico, tenta fazer desaparecer dela tudo quanto lhe é prejudicial e criar as melhores condições para a sua sobrevivência e afirmação. A sua pequenez física, um nada na vastidão física do universo em que está inserido, não inviabilizou nunca a gigantesca tarefa que pelo progresso técnico se propõe. No intelecto reside o seu grande poder, a sua indomável força de domínio que lhe permite ser, de facto, esse rei e senhor do mundo em que vive que para si reclamam, de há séculos a esta parte, tanto os homens da Bíblia como a maioria das mais primitivas religiões: o universo exterior a Deus existe para o Homem, neste se encontrando o seu centro natural, donde tudo dimana e a que tudo se orienta; tudo começou pelo Homem; tudo continua por ele e para ele; e tudo nele deve acabar.

"Então disse Deus: façamos o Homem à nossa imagem e semelhança. Que ele reine sobre os peixes do mar, os pássaros dos céus e os animais domésticos, sobre toda a terra e sobre todos os répteis que nela se arrastam. E Deus criou o Homem à sua imagem, homem e mulher, e os abençoou dizendo: crescei e multiplicai-vos; enchei a Terra e submetei-a; dominai sobre os peixes do mar, as aves do céu e todos os animais da Terra. Vossa é toda a erva que dá semente e vossas

são todas as árvores frutíferas para que vos sirvam de alimento" (1).

Na Natureza tudo se referencia em função do Homem; é a antropomorfização da Natureza. O panteísmo que tudo referencia em função do cosmos, numa cosmificação da Natureza, em geral, e do Homem, em particular, é uma elaboração cultural relativamente tardia.

Ser inteligente, o Homem especulou, ao longo de milénios, sobre a natureza e a origem do Universo. A antropocosmologia foi, desde o dealbar da atitude teórica, o tema central da sua meditação filosófica, na certeza de que "tudo aquilo que é cosmológico concerne ao homem; e tudo aquilo que é antropológico concerne essencialmente ao cosmos", como bem o notou Edgar Morin. Antropocentrismo e geocentrismo são as características fundamentais e estreitamente ligadas entre si, da primeira visão que para si construiu do cosmos, alicerçada na concepção dos mais influentes filósofos da Antiga Grécia, ciosa e autoritativamente tidos como mestres indiscutíveis até finais da Idade Média. De Aristóteles ao Renascimento do século XVI, pese embora o esporádico de uma que outra voz discordante, o Homem acreditou que a Terra é imóvel. A causa da sua imobilidade estaria na sua gravidade nativa. Porque esta seria a máxima possível, a Terra desde sempre terá desejado o lugar mais distante do céu, ou seja, o meio do mundo; pelo seu próprio ímpeto, associado à sua própria gravidade, assim o realizou e aí repousaria fixa, não podendo de lá ser tirada para outro lugar senão pela violência (2).

Muito antes de Aristóteles, logo nos alvares do pensamento grego, Anaximandro deixara-o bem claro: a Terra encontra-se em equilíbrio no centro do Universo, e não cai para qualquer dos lados, exactamente porque está localizada simetricamente em relação a tudo quanto a rodeia.

Centro do Universo, a Terra é o habitáculo sagrado do Homem "medida

de todas as coisas" (Protágoras) e a que todas as coisas estariam naturalmente ordenadas, alvo de todas as predilecções e cuidados do ser supremo, que nele teria sempre postas todas as suas atenções. No Universo, o Homem ocuparia, pois, no mundo geocêntrico da filosofia de Aristóteles, um lugar de privilégio, simultaneamente como ser vivo e como ser inteligente; nele, o seu conhecimento intelectual atingiria o próprio princípio das coisas, a causa e razão última do seu devir, o fim que as habita e organiza (3).

Geo- e antropocêntrico, o universo de Aristóteles seria **estático** e **fechado**. Estático, no sentido de que se mantinha idêntico a si mesmo e invariável no seu todo, do primeiro ao último instante da sua existência; fechado, porque um todo finito e bem ordenado, com uma estrutura espacial em que tudo está devidamente hierarquizado, onde reinam a coerência, a beleza, a perfeição. Para além da região sub-lunar de mudança e corrupção, onde se encontra a Terra pesada e opaca, estão as esferas celestes dos astros imponderáveis, incorruptíveis e luminosos, circunscritas pela esfera última das estrelas fixas.

Esta imagem do Universo começa a ser posta em causa pelos fins da Idade Média. Ao homem é negado o lugar de privilégio por ela afirmado. Muito antes mesmo do heliocentrismo proclamado por Copérnico, ganhou terreno a ideia de um universo sem qualquer centro físico. O geocentrismo foi arduamente confrontado com a ideia do sine-centrismo, a ideia de um universo sem qualquer centro físico.

Pioneiro, **Nicolau de Cusa** (1401-1464) declarou-o peremptoriamente: o universo não tem qualquer centro físico, mas tão somente um centro metafísico, o seu princípio e fim, o seu fundamento e limite, o próprio Deus, ser absoluto, de que é expressão (**explicatio**) imperfeita e inadequada, no reino da multiplicidade e da separação. Metafísico, este centro não



pertence ao mundo: "é impossível que a máquina do mundo tenha um centro fixo e imóvel, quer este seja esta terra sensível, ou o ar, ou o fogo, ou não importa qualquer outra coisa". Com efeito, sendo o centro um ponto equidistante da circunferência, o centro do mundo nunca poderia estar no interior da terra, nem fora dela, já que uma equidistância precisa a tudo quanto existe não pode ser encontrada fora de Deus, que só Ele é a igualdade infinita. Só Deus pode ser o centro da Terra e de todas as esferas celestes, assim como de tudo o que está no mundo. Porque não tem qualquer outro centro que não seja o próprio Deus, o mundo não tem também circunferência, ou, por outras

palavras, centro único do mundo, Deus é também a circunferência infinita de todas as coisas: "o mundo não tem circunferência. Porque se tivesse um centro ele teria também uma circunferência, e assim teria em si próprio o seu começo e o seu fim, e estaria limitado em relação a algo de outro; assim, fora do mundo haveria algo de outro, e espaço, coisas que carecem de toda a verdade. Como, portanto, não é possível encerrar o mundo entre um centro corporal e uma circunferência, não podemos compreender o mundo de que o centro e circunferência são Deus" (4).

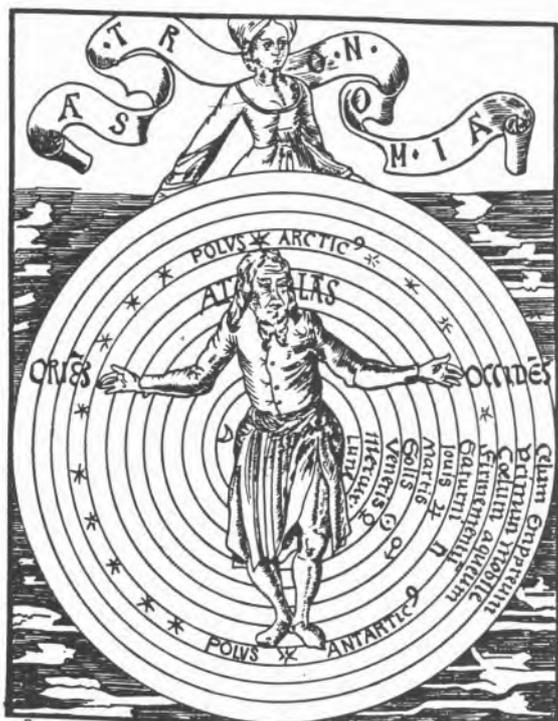
Assim entendido, o Universo não estaria "contido" na carapaça ex-

terior das esferas celestes, como não seria um Universo "terminado" nos seus constituintes, isto é, careceria de todo de precisão e determinação rigorosas (5). Nem a Terra, nem outra coisa qualquer podem estar colocados no centro do Universo, pura e simplesmente porque tal centro não existe fisicamente. Não há estrelas situadas **exactamente** sobre os polos ou sobre o equador da esfera celeste; não há eixos fixos e constantes. Nada neste mundo pode estar completa e absolutamente em repouso.

Neste sinecentrismo físico do Universo proclamado por Nicolau de Cusa encontramos o primeiro passo no sentido da afirmação de um universo infinito, desprovido de coerência e caracterizado por uma extensão infinita e homogênea. Com ele se começa a definir a ideia de um **universo aberto e infinito**, um universo onde o homem está entregue a si mesmo, ao seu livre-arbitrio, aos seus valores morais, cabendo a cada um "escolher o seu deus e o seu demónio" (6) que a ciência moderna acabaria por assumir.

Neste universo sem centro nem direcção privilegiada, a Terra passaria, pouco a pouco, a ser considerada como um pequeno fragmento entre muitos outros de valor idêntico, ou mesmo superior. Ganhou foros de simplista a ideia de que a Terra é única, como objecto individual sem paralelo em qualquer ponto do universo, em singularidade capaz de exigir uma morada especial. Na extensão infinita e homogênea do universo ilimitado e povoado por toda a parte, deixa de haver lugar para qualquer hierarquia natural de valor, perfeição ou harmonia, na multiplicidade dos corpos que o compõem; todos são colocados no mesmo nível ontológico, num espaço que não é mais um conjunto diferenciado de locais intramundanos, mas antes o espaço geométrico euclidiano, idêntico, na sua estrutura, ao espaço real do universo (7). No seu género, a Terra é tão perfeita quanto o sol e as estrelas fixas nos céus (8).

Esta deslocação da Terra do centro do mundo, negando ao homem uma posição única e privilegiada no drama teocósmico da criação não foi sentida, a princípio, como uma degradação. Para Nicolau de Cusa, a infinitização do Universo envolvia mesmo a promoção da Terra à categoria das estrelas nobres: "a Terra é,



portanto, uma estrela nobre que tem uma luz, um calor e uma influência próprias e distintas das de todas as outras estrelas; assim como cada uma delas, difere de todas as outras em luz, em natureza e em influência" (9).

De igual modo, para **Giordano Bruno** (1548-1600), a dispersão das esferas das estrelas fixas representava a abertura do homem aos tesouros inesgotáveis do universo eterno e ilimitado, onde o movimento e a mudança permanentes seriam sinais de perfeição e vida. Ao contrário do que pensavam os Antigos, segundo Giordano Bruno, o universo para ser vivo deve poder mover-se e mudar; um universo imutável seria necessariamente um universo morto: "não existem termos, limites, margens, muralhas que nos defraudem e roubem a infinita cópia das coisas. Daí, ser fecunda a terra e o seu mar; daí ser perpétua a chama do sol, subministrando eternamente alimento aos fogos vorazes, e humores aos mares empobrecidos, porque do infinito nasce sempre nova cópia da matéria" (10). O mundo finito compreenderia somente a perfeição de todas as coisas finitas que estivessem no seu espaço, mas nunca a das coisas infinitas que pudessem existir noutros espaços inumeráveis (11).

Tornada obsoleta, do ponto de vista ontológico, a distinção entre os vários mundos que constituem o universo, nomeadamente o mundo celeste e o mundo terrestre, e afirmada a impossibilidade de atribuição de um limite ao universo, o homem perdeu inevitavelmente a condição de posição única e privilegiada que até então lhe fora reconhecida. O centro do universo estaria em toda a parte e a sua circunferência em parte alguma e, conseqüentemente, a designação de centro passaria a convir, de igual modo, a cada mundo particular, a cada estrela, a cada sol, e não ao universo em si mesmo, constituído pela pluralidade dos mundos, no sentido que ao termo "mundo" dava a tradição grega e medieval, significando um todo completo, possuindo em si próprio o seu centro. Não haveria um centro do universo, mas uma multidão de centros, uma para cada sistema solar. O do sistema solar a que a Terra pertence está no próprio sol e não na Terra. Por referência a ele, o homem está em pé de igualdade de outros possíveis seres de idêntica dignidade de que os diferentes mundos possam, porventura, estar povoados (12).

Para o homem que se cria colocado num mundo finito, com seu centro na Terra, onde tudo, por sua vez, teria sido destinado para sua própria existência, serviço e contemplação, um mundo infinito parece despropositado, sem sentido e falho na sua finalidade. Que utilidade poderão ter todas essas estrelas inumeráveis que nem sequer podemos ver, seja a olho nu, seja através do mais potente telescópio? Não admira pois que o antropocentrismo cristão agarrado a muitas e variadas provas de acção teleológica de Deus no mundo, tenha sido, durante muito tempo, um dos grandes adversários da ideia de um mundo infinito. Afirmar um mundo infinito contra um mundo finito parecia levar à negação da sua finalidade, degradando o mundo real, dentro dele, degradando o próprio homem, criado à imagem e semelhança de Deus, para ser dele rei e senhor. Não tardou, porém, que os defensores da infinidade do universo e mesmo muitos dos que crendo na sua finidade admitiam a infinidade como possível, se não deixassem persuadir por tais arrazoados. "Se a Terra foi destinada para a existência, serviço e contemplação do homem, porque não seriam os outros

planetas criados para usos semelhantes, possuindo cada um deles os seus próprios habitantes dotados de visão e de inteligência?" - interrogar-se-ia Bentley na sua refutação do ateísmo (13).

A nova cosmologia impunha uma nova compreensão do destino do homem em defesa da sua própria dignidade e situação num universo infinito. As mais proeminentes figuras da nova ciência sentiram essa necessidade e a ela não ficaram alheias.

Giordano da Bruno fê-lo expressamente, considerando quer o aspecto social, quer o aspecto pessoal da problemática gerada (14). Para ele, num universo infinito, a divindade não pode existir senão nas coisas que o compõem. Por isso, os homens, como todas as demais coisas, animadas ou inanimadas, não são senão modalidades transitórias do próprio Deus. Não tem sentido o dualismo Céu-Terra, nem o dualismo Deus-Universo. Ao ser deslocado da sua posição central no universo por negação da própria existência de uma tal posição, a afirmação do Homem no Universo sairia, assim, ainda mais enaltecida: o seu destino não tem o universo ao seu serviço; o seu destino confunde-se com o destino do universo.

Mais do que nunca o homem se afirma como um microcosmos, penetrado de toda a espécie de forças cósmicas, capaz de agir sobre si mesmo e sobre os outros seres do universo por uma acção de simpatia que liga entre si as diferentes partes do mundo (15).

Kepler (1571-1630) não aceitava a concepção da infinidade do universo proposta por Bruno que se lhe afigurava ser mera expressão de um sentimento religioso, fora da alçada da ciência astronómica a que se dedicava, uma ciência rigorosamente confinada ao mundo dos fenómenos físicos. Para Kepler, embora o universo possa ser tão grande quanto o queiramos, não podem existir estrelas - e em qualquer caso estrelas visíveis - separadas de nós por uma distância efectivamente infinita, pois seria necessário que fossem elas próprias de dimensões infinitas para que isso acontecesse. Conseqüentemente, e de um ponto de vista estritamente fenomenológico, "o universo, no seu interior, em direcção ao sol e aos planetas, seria necessa-

riamente finito e, de algum modo, oco. O resto pertence à metafísica" (16). A infinidade de um mundo implicaria necessariamente uma uniformidade perfeita da sua estrutura e o seu conteúdo, o que do ponto de vista fenomenológico, seria precisamente o contrário do que observamos: "o aspecto das estrelas fixas, vistas umas das outras é diferente do que é visto do nosso mundo, e estamos mais afastados das estrelas fixas do que elas o estão umas das outras" (17).

Por sua vez, **Galileu-Galilei** (1564-1642) não deu grande importância à questão da infinidade ou não infinidade do universo, considerando tratar-se de uma questão insolúvel, como expressamente o declara na carta que escreveu, em 1639, a Francesco Ingoli: "e não sabeis que é ainda incerto (e creio que o será sempre para a ciência humana) se o mundo é finito ou, pelo contrário, infinito. E se ele fosse verdadeiramente infinito, como poderíeis vós afirmar que as dimensões da esfera estrelada são proporcionais às da *orbis magnum* se esta, em relação ao universo, é mais pequena que um grão de milho em relação a ela?" (18).

E repetia-o no **Diálogo Sobre os Dois Grandes Sistemas do Mundo** (1632), onde Salviati, porta-voz das suas ideias, se dirige contundentemente ao aristotélico Simplicio nestes termos: "nem vós nem qualquer outro provou alguma vez que o mundo seja finito e dotado de uma forma ou, pelo contrário, infinito e interminado" (19). Todavia, na carta que dirigiu, em 1640, a Fortunio Liceti, mostrar-se-ia mais inclinado para a ideia de um universo infinito do que para a ideia de um universo finito: "foram alegadas numerosas e subtis razões em favor destas concepções, mas nenhuma delas, em minha opinião, conduz a uma conclusão necessária, de modo que permaneço na dúvida quanto à verdade de uma ou de outra destas asserções. Existe um único argumento que me é próprio, que me inclina mais para o infinito e o interminado (...); sinto que a minha incapacidade de compreender poderia com maior propriedade ser referida à incompreensível infinidade do que à finidade, onde se não encontra nenhum princípio de incompreensibilidade" (20).

De salientar que o modo um tanto quanto displicente com que Galileu abordou esta questão tanto pode ser fruto do pouco interesse que, de

modo geral, votou aos problemas de cosmologia, mais interessado na geometrização da física do que na geometrização do espaço, como de uma atitude de prudência perante a Igreja, face à condenação de Bruno, em 1600, e de Copérnico, em 1616.

Para **Descartes** (1596-1656), o mundo real que é o universo é um "mundo de geometria reificada, um mundo matemático rigorosamente uniforme" (21), feito somente de espaço e movimento. O espaço identifica-se com a matéria que é ela própria extensão a que não é apenas falso ou absurdo atribuir quaisquer fronteiras, mas também contraditório. Como tal, o mundo é infinito: "a matéria extensa que compõe o universo não possui quaisquer limites porque, não importa onde os queiramos simular, podemos imaginar sempre para além deles espaços indefinidamente extensos, que não somente imaginamos mas concebemos serem na realidade tais como os imaginamos" (22).

Para Descartes, não faz sentido discutir se as estrelas fixas são grandes ou pequenas, se estão distantes ou próximas, pois que distantes ou próximas, elas estão, como nós próprios e como o nosso sol, no meio de outras estrelas sem fim. O universo é uma unidade onde o número de sistemas subordinados e ligados entre si é em número indefinido, formando imensos turbilhões ou vórtices de matéria sempre idêntica, que, no espaço ilimitado, se tocam e se limitam uns aos outros. Tanto na extensão física, como na série dos números, é sempre possível ir mais além sem nunca se alcançar um termo.

"E chamaremos a estas coisas *indefinidas* em vez de infinitas, a fim de reservarmos apenas para Deus o nome de infinito" (23).

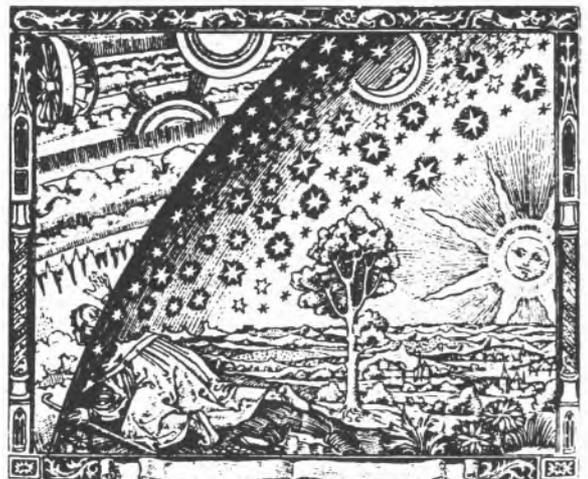
Quer dizer, Descartes distingue entre infinito e indefinido. Infinito só Deus o é; o universo é, antes, indefinido. Esta distinção corresponde, em Descartes, à distinção tradicional entre **infinidade actual** e **infinidade potencial**. Somente a respeito de Deus possui o homem garantia clara de que ele é infinito em acto, porque absolutamente perfeito; "quanto às outras coisas, sabemos que elas não são absolutamente perfeitas porque, embora notemos nelas, por vezes, propriedades que nos parecem não ter limites, não deixamos de saber que isso procede da

imperfeição do nosso conhecimento e de modo algum da sua natureza" (24). Para Descartes, a infinidade não se conhece pela negação da finidade mas, pelo contrário, é negando o infinito que se concebe o finito. Porém, o infinito ultrapassa de tal modo o entendimento humano, que é finito, que não podemos compreendê-lo, nem sequer analisá-lo inteiramente senão em termos de indefinido. E daí que se tornem desprovidas de qualquer valor todas as discussões sobre o infinito, nomeadamente as discussões sobre a composição do contínuo, tão em voga nos finais da Idade Média.

"Não é necessário esforçarmo-nos por compreender o infinito, mas somente pensar que tudo aquilo em que não encontramos quaisquer limites é indefinido. Desta maneira, jamais nos enredaremos nas disputas sobre o infinito; tanto mais que seria ridículo que nós que somos finitos, empreendêssemos determinar qualquer coisa sobre ele e por este meio supô-lo finito ao esforçarmo-nos por compreendê-lo. É por isso que não cuidaremos de responder aos que perguntam se a metade de uma linha infinita é sempre infinita, ou se o número infinito é ou não par, e outras coisas semelhantes, dado que apenas aos que crêem que o seu espírito é infinito parece deverem ser examinadas tais dificuldades" (25).

O universo é infinito porque não é possível assinalar-lhe quaisquer limites. Sem limites, ele é um universo aberto.

Newton (1642-1727) escreveu, como matemático, sobre o **movimento**



eterno, uniforme e rectilíneo de um corpo. A ideia de eternidade possível de um movimento tem subjacente a ideia de um universo infinito. O movimento não pode ser infinito se confinado a dimensões finitas. No universo finito dos Antigos, à dimensão finita das esferas celestes, correspondia uma velocidade finita. Só relativamente a um espaço sem limites se pode conceber um movimento eterno (26). Mais. Só um espaço infinito explicaria –

igualmente distribuída através de um espaço infinito, ela jamais se poderia reunir numa só massa; parte dela reuniria-se numa massa, enquanto outra parte se reuniria noutra massa, de modo a formar um número infinito de grandes massas, a grandes distâncias umas das outras através deste espaço infinito” (27).

A ciência e filosofia newtonianas, na sua forma genérica da chamada teoria da gravitação universal, conquistaram rapidamente o mundo científico, pese embora a resistência dos discípulos de Descartes e outros filósofos do Continente. Por volta do fim do século XVII, ela estava definitivamente bem implantada em todo o mundo culto ocidental. O universo da sua cosmologia é um universo homogéneo e infinito na duração e na extensão, no qual a matéria eterna, de acordo com leis eternas e necessárias, se move sem fim e sem objectivo, no espaço eterno. Os seus atributos ontológicos são, portanto, os atributos do próprio Deus.

Com Newton, o universo passou a ser pensado como um grande relógio mecânico posto em movimento no início dos tempos pela mão divina e depois abandonado às leis nele inscritas.

Assim o encararam, entre muitos outros pensadores de renome, **N. Malebranche** (1638-1715), **G. W. Leibnitz** (1646-1716) e Pierre Simon, **Marquês de Laplace** (1749-1827).

Neste Universo, dos maiores aos mais pequenos movimentos, toda a criação evolui de uma forma que pode ser prevista com precisão absoluta pelas leis de Newton, pois nada é deixado ao acaso. O futuro é totalmente determinado pelo passado. Tudo o que acontece está pré-determinado. O universo objectivo existe independentemente da vontade e da finalidade do homem. Este integra-o em estrito acordo com as leis eternas que o regem. A rigidez do determinismo a que estas leis conduzem confere ao homem um sentimento de particular segurança acerca do seu lugar no universo, seja este povoado ou não por outros seres inteligentes.

Não obstante as dificuldades de primeira hora, os grandes avanços científicos do século XIX, particularmente os relacionados com a teoria do calor, a teoria da luz como onda electromagnética, e os demais fenó-

menos eléctrico-magnéticos em geral, foram construídos no âmbito do quadro conceptual de uma física determinista, logicamente radicada na física clássica newtoniana.

Nos fins do século XIX e princípios do século XX, o desenvolvimento da teoria sobre a estrutura atómica da matéria, levaria ao ruir parcial dessa imagem determinista do universo. Com efeito, as unidades atómicas da matéria revelavam um comportamento aleatório e incontrolável que a física determinista de Newton não permitia descrever satisfatoriamente. E tornou-se óbvio que não era possível compreender cabalmente o início e o fim do universo sem ir além da teoria da gravitação de Newton. Assistiu-se à formulação, primeiro, da teoria da Relatividade Restrita (1905), e, depois, em 1916, à formulação da teoria da Relatividade Geral, uma e outra da autoria de Einstein; e assistiu-se, também, à formulação da teoria quântica, no decorrer dos anos de 1900 a 1926.

Formularam-se novas questões sobre a natureza do universo. Especificamente, estudando a sua imensidade, com ênfase na geometria, a Teoria da Relatividade Geral formulou uma nova visão da natureza. Em 1922, o físico soviético **Alexander Friedman** resolveu as equações da Relatividade Geral de Einstein referidas ao próprio universo, imaginado como um gás uniforme em que as partículas seriam as galáxias. As soluções encontradas para essas equações implicavam que o universo não podia ser estático. O Universo é um universo em evolução; o gás das galáxias tinha de se expandir ou de se contrair.

A energia total de qualquer galáxia componente deste gás de galáxias é dada por $m R^2(1/2 H^2 - 4/3 \pi \rho G)$ onde m é a massa da galáxia, R , a sua distância relativamente a um centro de referência do meio em que existe, H , a constante de Hubble, ρ , a densidade de massa cósmica e G , a constante de gravitação de Newton. As galáxias escapar-se-ão para o infinito, e teremos um universo em expansão, desde que a sua energia seja positiva. Para E (energia) = 0, define-se a velocidade de escape da galáxia, correspondendo à situação em que $1/2 H^2 = 4/3 \pi \rho G$, ou seja, à chamada densidade crítica dada por $\rho = 3H^2/8 \pi G$. Para um valor de $H = 15$ Km por segundo por milhão de anos-luz, obtém-se um valor de ρ da ordem



segundo Newton – a actual composição do universo: “se toda a matéria do nosso sol, e toda a matéria do universo, estivessem igualmente dispersas através de todos os céus, e cada partícula possuísse uma gravidade inata em direcção a tudo o resto, e todo o espaço através do qual esta matéria estivesse dispersa fosse apenas finito, a matéria situada nos confins deste espaço tenderia, pela sua gravidade em direcção a toda a matéria colocada no interior e, conseqüentemente, cairia em direcção ao centro do espaço inteiro, e formaria aí uma grande massa esférica. Mas se a matéria estivesse

dos $4,5 \times 10^{-30}$ gramas por centímetro cúbico. Ora a densidade de massa cósmica actual é da ordem de $2,7 \times 10^{-6}$ partículas nucleares por centímetro cúbico o que significa que a energia de qualquer galáxia é positiva, ou seja, que as galáxias se estão a afastar cada vez mais umas das outras (28). Neste sentido, o universo em que vivemos é realmente um universo aberto e, como tal, infinito.

Com o arrefecimento progressivo que se foi operando no universo, após a explosão inicial, a densidade de energia radiante foi decrescendo e a densidade de matéria aumentando. Uma e outra poderão ter existido em quantidades idênticas após os primeiros 250 milhões de anos da existência do universo. A partir de então, a densidade da matéria passou a ser superior à densidade de energia radiante, tornando possível uma diferenciação progressiva na homogeneidade inicial do gás-galáctico, o *ylem* a que se refere **G. Gamow** (1904-1968) (29).

De notar aqui que, a princípio, Einstein não acreditou nos cálculos de Friedman e pensou que ele se tivesse enganado. Acreditando que o universo existia desde sempre e para sempre, e aceitando também a sua infinidade espacial, Einstein, tal como a maioria dos físicos e astrónomos do seu tempo, cria que o universo era estático. Um universo dinâmico e com evolução parecia-lhes contrário a toda a experiência, e uma novidade artificial. Verificada a exactidão dos cálculos de Friedman, como acreditava que o universo era estático, Einstein foi ao ponto de alterar as suas equações da relatividade, acrescentando-lhes um "termo cosmológico" que permitia uma solução estática. No quadro dos seus princípios relativistas que davam conteúdo inteiramente novo às ideias de espaço, tempo e matéria relativamente às que informavam a mecânica da física clássica, esse termo cosmológico permitia-lhe concordar com Newton em que o movimento do universo estava completamente determinado desde o passado infinito até ao futuro também infinito.

Em 1927, **G. H. Lemaitre** (1894-1966) demonstraria categoricamente que o universo em expansão está totalmente de acordo com a teoria da relatividade. A partir de um "átomo primitivo", sem estrutura mecânica e sem movimentos internos, pura con-

densação de todas as potencialidades energéticas e de todas as formas atômicas virtuais implicadas no desenvolvimento futuro, o universo teria-se organizado estruturalmente graças a uma explosão inicial super-radioactiva, em duas fases sucessivas de expansão separadas por uma instabilidade gravitacional (30). Einstein acabaria por aceitar a ideia de um universo em expansão, confessando, então, que o termo cosmológico que introduzira nas equações da relatividade tinha sido "o maior disparate" da sua vida.

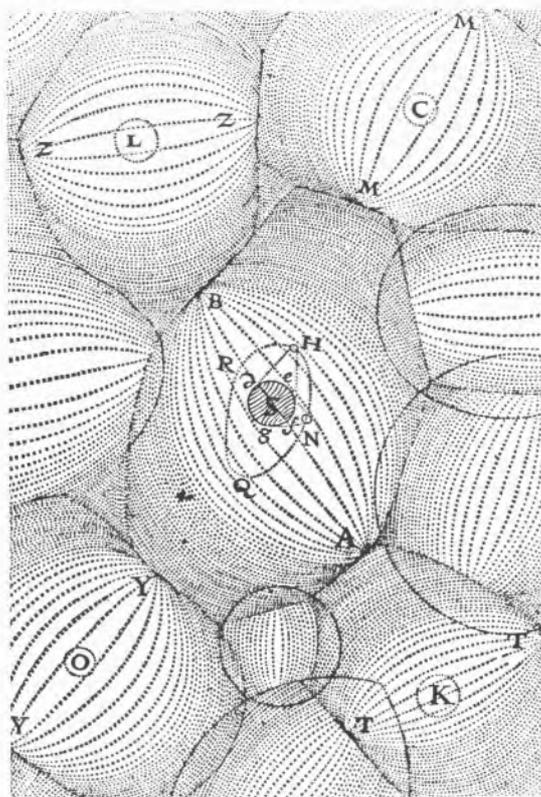
Em 1929, o astrónomo americano **Edwin Hubble** (1889-1953), com base num estudo pormenorizado das galáxias distantes, concluiria que o universo em que vivemos é, de facto, um universo em expansão, uma expansão determinada pelo afastamento mútuo das galáxias, quer pela produção, sob o efeito da interacção dos fótons com o campo espacial, de um conjunto de modificações que poderão alterar a métrica do espaço, quer pelo crescimento do espaço por dentro, correspondente, por reflexo e formalmente, a uma fuga real das galáxias (31).

Hoje, a maioria dos físicos e astrónomos aceita a teoria do universo em expansão, contra alguns defensores dos chamados **modelos estáticos** do universo, nomeadamente os defensores da chamada **cosmologia da criação contínua** proposta por **H. Bondi**, **T. Gold** e **F. Hoyle** da Universidade de Cambridge, em 1948 (32). Para os defensores do universo em expansão, o universo infinito e aberto defendido pela cosmologia heliocêntrica do Renascimento, na negação do geo- e do antropocentrismo dos Antigos, é, além disso, um universo dinâmico.

2. DETERMINISMO E INDETERMINISMO

Como notámos, a tentativa de Einstein de conciliar o carácter estático do universo com a teoria geral da relatividade era a salvaguarda do quadro determinista da física clássica. A ideia de que o mundo não existe independentemente da nossa observação, isto é, que a realidade possa, em parte, ser criada pelo observador, inerente, de algum modo, à teoria da Relatividade Geral aplicada às partículas quânticas, é, em si mesma, uma ideia chocante e daí que haja dentro de nós algo que se recusa

tenazmente a aceitá-la de boa-vontade, como realidade inevitável. Einstein opôs-se-lhe com decisão. Se tal ideia se constituiu em "dogma" da ciência do nosso tempo, poderíamos então dizer que Einstein **quase** morreria impenitente pois que, quase até ao fim da sua vida sustentou que o universo é



indiferente à humanidade e aos seus problemas, como a natureza é indiferente às opções humanas.

As reservas que se põem à sua "impenitência" até final ajudam a melhor compreender a sua posição. Em carta para Max Born, datada de 31 de Março de 1954 (um ano antes da morte de Einstein!), W. Pauli dá conta de conversas que tivera ultimamente com Einstein, em Princeton, referindo nomeadamente, que Einstein não considerava já o conceito de "determinismo" tão fundamental quanto frequentemente ele é tido por ser. Textualmente, Pauli escreve: "o ponto de partida de Einstein é "realista" e não "determinista", o que significa que o seu preconceito filosófico é diferente" (33). Por sua vez, na sua autobiografia

intelectual, Popper refere, a propósito de uma visita que fizera a Einstein, em 1950: “o tópico principal da nossa conversa foi o indeterminismo. Tentei convencê-lo a abandonar o seu determinismo, que equivalia à ideia de que o mundo era um universo-bloco parmenidiano tetradimensional no qual a mudança era uma ilusão humana, ou perto disso. (Ele concordou que a sua perspectiva tinha sido essa, e, enquanto a discutíamos, chamei “parmenídes” a Einstein). Argumentei que se os homens ou outros organismos podiam ter experiência da mudança e da autêntica sucessão do tempo, então isso era real. Não se podia afastar explicando-a por uma teoria do sucessivo surgimento à nossa consciência de porções do tempo que num certo sentido coexistem; é que essa espécie de “surgimento à consciência” teria precisamente o mesmo carácter que a sucessão de mudanças que a teoria tenta explicar e afastar. Introduzi também os argumentos biológicos, de certo modo óbvios: que a evolução da vida e a maneira como os organismos se comportam, especialmente os animais superiores, não se pode verdadeiramente compreender com base em qualquer teoria que interprete o tempo como se ele fosse algo como outra coordenada espacial (anisotrópica). De resto nós não temos experiência das coordenadas espaciais. E é por isso que elas são muito simplesmente inexistentes: temos de ter cuidado para não as hipostasiarmos: são constru-

ções quase totalmente arbitrárias. Por que é que então haveríamos de ter experiência da coordenada tempo – decerto a única adequada ao nosso sistema inercial – não só como realmas também como absoluta, isto é, como inalterável e independente de qualquer coisa que possamos fazer, a não ser mudar o nosso estado de movimento?” (34).

Mais adiante, Popper continua: “ora, eu tentei apresentar a Einstein-Parménides, com tanta força quanto me foi possível, a minha convicção de que se deve tomar uma clara posição contra qualquer visão idealista do tempo. E tentei também mostrar que, ainda que a visão idealista fosse compatível tanto com o determinismo como com o indeterminismo, se devia tomar uma posição clara a favor de um universo “aberto” – um universo no qual o futuro não estivesse em sentido nenhum contido no passado ou no presente, se bem que estes lhe impusesse severas restrições. Argumentei que não nos devíamos deixar dominar pelas nossas teorias e ser levados a abandonar o senso comum com demasiada facilidade. Era evidente que Einstein não queria abandonar o realismo (a favor do qual os argumentos mais fortes se baseavam no senso comum), ainda que ache que ele estava disposto a admitir, tal como eu, que um dia poderíamos ser forçados a abandoná-lo se fossem avançados argumentos muito poderosos (do tipo do de Godel, digamos) contra ele” (35).

Sem negar minimamente o valor do génio científico de seu mestre e fator que foi Einstein, a ciência do século XX não hesitou, todavia, no trilhar de caminhos diferentes. Como Karl Popper o tem frisado, em diversas circunstâncias, **o universo aberto** tornou-se o termo de referência de argumentação decisiva a favor do indeterminismo e o requisito de uma sociedade fundada sobre a liberdade, a criatividade e a racionalidade do homem. Os próprios títulos de algumas obras científicas deste proeminente filósofo da ciência de nossos dias, apresentadas como pré-escritas à sua **Lógica da Descoberta Científica** (36a) são por si só elucidativos: **O Universo Aberto, Argumentos a favor do Indeterminismo** (34) e **Sociedade Aberta, Universo Aberto** (36b).

Todavia, impõe-se notar que **universo aberto** não tem aqui

exactamente o mesmo significado que antes referimos. Estritamente determinista, o universo infinito da física clássica é um universo aberto no sentido que não é possível assinalar-lhe quaisquer limites ontológicos, no espaço e no tempo; não o é, no entanto, do ponto de vista metafísico e lógico, pois é **causalmente** fechado.

A formulação mais clara do determinismo físico subjacente à física clássica deve-se a Laplace, com base na mecânica de Newton. De acordo com ele, dadas a massa, posição e velocidade exactas de todas as partículas do universo num momento de tempo, é possível calcular, usando as leis da mecânica newtoniana, tudo o que alguma vez nele aconteceu no passado e tudo o que virá a acontecer no futuro, incluindo todos os movimentos físicos de todos os homens. Para tanto, bastaria dispor de uma máquina suficientemente potente para comportar a complexidade dos cálculos envolvidos, e uma inteligência suficientemente superior para os equacionar.

Este determinismo rigoroso de Laplace teve de ser modificado perante a ruína de algumas tentativas de Maxwell para reduzir os fenómenos eléctricos e magnéticos à mecânica de Newton. Recorreu-se, então, a um modelo mecânico do éter. Com essas tentativas ruíu também a tese do carácter fechado do mundo da física, embora a tese fundamental do determinismo universal não tenha sido muito afectada. Só com a mecânica quântica, ele seria radicalmente posto em causa.

Segundo a mecânica quântica, há processos físicos elementares, v.g., as transições electrónicas nos átomos, causalmente irreduzíveis, isto é, que não são analisáveis em termos de cadeias causais; são os chamados “saltos quânticos, acontecimentos imprevisíveis, não controlados nem por leis naturais, nem pela coincidência de leis causais, mas só por leis probabilísticas”. Concretamente, não existe nenhuma lei física que nos diga exactamente quando é que uma transição electrónica vai ocorrer; o máximo que podemos fazer, no domínio deste tipo de transições é determinar a probabilidade de uma dada transição ocorrer (37). Tais acontecimentos não são pré-determinados e não podem, portanto, ser previstos com toda a precisão, por muito grande que seja o nosso conhecimento de todas as condições



relevantes anteriores ao acontecimento. A sua imprevisibilidade plena é intrínseca à sua própria natureza e não apenas epistemológica. Acerca de tais processos, só previsões estatísticas testáveis são possíveis (38).

O carácter indeterminista de certos processos físicos elementares considerados na base da mecânica quântica torna-se mais patente com a introdução do conhecimento humano objectivo no universo físico, fazendo ressaltar o que Popper designou por a "essencial abertura ou inacabamento" (*incompleteness*) desse mesmo universo. Na sua totalidade, que inclui a vida e a consciência, a Natureza não pode ser totalmente pré-determinada (39). O universo que contém o conhecimento humano como parte dele é, forçosa e intrinsecamente, um universo "parcialmente causal, parcialmente probabilístico, parcialmente aberto"; é, usando a terminologia de Karl Popper, **um universo emergente**, onde a liberdade humana, fazendo parte efectiva da natureza, a transcende.

Do ponto de vista das ciências exactas, é particularmente relevante o carácter indeterminista de certos processos elementares considerados na base da mecânica quântica. Sobre ele nos debruçaremos com mais algum pormenor, referindo as características fundamentais da chamada "peculiaridade quântica" (40).

A teoria quântica nega a ideia de objectividade imanente à física clássica, e não deixa lugar para a imagem determinista do mundo. O que acontece no mundo quântico, o micromundo, não obedece a leis deterministas. Além disso, depende da forma como é observado, isto é, não existe independentemente da observação; o que existe depende, em parte, daquilo que o observador decide observar. O micromundo é mera fantasia se não for observado. Como o disse um dia John Wheeler, no mundo quântico "nenhum fenómeno é fenómeno até ser fenómeno observado" (41).

Embora contrários ao mais elementar sentimento de um certo realismo ingénuo sequioso de uma total coincidência entre o mundo das aparências e o mundo da realidade, estes postulados-chave da teoria quântica são matematicamente coe-rentes e concordam espectacularmente com a experiência, por mais que possam não satisfazer o espírito científico.

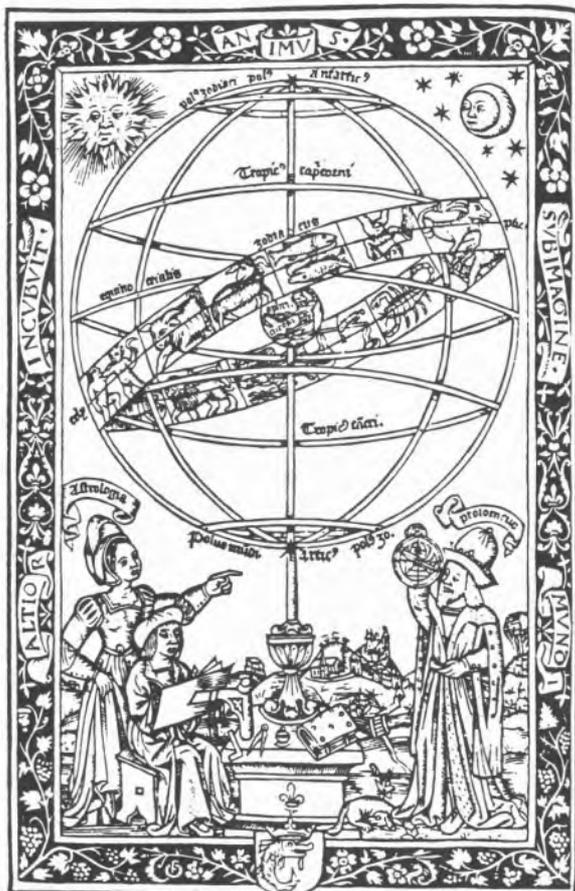
Felizmente, temos apenas de nos preocupar com a realidade determinada pelo observador para objectos de dimensões quânticas, já que existe uma diferença qualitativa importante e essencial entre o micromundo e o macromundo: enquanto este pode acumular informação, naquele tal não acontece. Quer dizer, no micromundo dos **quanta**, a realidade é uma distribuição aleatória de acontecimentos que o observador, no próprio acto de observar, transforma noutra igualmente aleatória. Nele, não têm significado acontecimentos isolados. Consequentemente, a teoria da medida quântica é uma teoria da informação: o mundo quântico confunde-se com aquilo que sobre ele podemos saber. E, por isso, não é possível adaptar a realidade quântica à realidade clássica, onde os acontecimentos individuais, no espaço e no tempo, são possíveis e existem (42).

Porque a intencionalidade humana influencia a estrutura do mundo físico, com carácter determinante no mundo quântico, e porque, como já o dissemos, a liberdade humana, embora nela inserida, transcende a natureza, a teoria quântica rejeita o determinismo laplaciano. Em vez dele, aceita a natureza estatística da realidade. Esta aceitação é o essencial da chamada interpretação da mecânica quântica consagrada pela escola de Copenhaga que embora aceite pela maioria dos físicos, teve à partida a reserva de muitos deles e a tenaz oposição de Einstein que, inclusivamente, durante vários anos, imaginou diversas experiências conceptuais que mostrassem alguma falha subjacente a tal interpretação, qual, por exemplo, a conhecida experiência conceptual do relógio dentro de uma caixa (43) com que supôs mostrar a violação flagrante da relação de indeterminação de Heisenberg energia-tempo, $\Delta E \times \Delta t > h$. A refutação dos resultados dessas "experiências", em que se empenhou particularmente Bohr, fez com que Einstein deixasse de contestar a coerência interna da teoria quântica na sua interpretação de Copenhaga; não o convenceu, todavia, a aceitar que a teoria quântica assim assumida desse uma descrição completa e objectiva da natureza. Até ao fim da sua vida, em 1955, Einstein acreditaria que o universo é indiferente à humanidade e aos seus problemas e que Deus não joga aos dados. Não



obstante, a interpretação de Copenhaga generalizou-se, afirmou-se e ganhou raízes sólidas no mundo científico. A Mecânica Quântica tornou-se rapidamente, nas mãos de uma pleiade de jovens físicos, muitos deles menos interessados nos problemas de interpretação do que nas suas aplicações, no mais poderoso instrumento matemático para a explicação dos fenómenos naturais, em física, em química e em biologia, provando à saciedade que a negação do determinismo rígido dos fenómenos da natureza não significava o fim da ciência, nomeadamente o fim da física ou da química.

Confrontados com o acaso que reina no interior da matéria, os cientistas tiveram de proceder ao estabelecimento de uma nova visão da realidade, mas não ficaram minimamente cerceados, nem impossibilitados, no prosseguimento de sua missão científica. Empenhada em tornar os fenómenos naturais imediata ou directamente compreensíveis à nossa maneira de pensar, pela descoberta experimental e estabelecimento teórico da ordem conceptual subjacente à toda a natureza, à ciência moderna poderá ter parecido, por um momento, ser impossível prescindir do rígido determinismo fenoménico, fundamento



objectivo da lei e da racionalidade do universo. E daí a confusão que frequentemente se gerou, em alguns meios, entre a negação de um universo causalmente fechado e um universo a-causal (44).

A afirmação do acaso que domina os fenómenos do mundo microfísico não pode ser tomada no sentido de uma concepção negativa do acaso, isto é, no sentido de se admitir que algo possa acontecer sem qualquer causa ou lei. Dizer que o mundo dos fenómenos quânticos está informado pelo acaso é antes afirmar a interferência ou concurso de dois ou mais acontecimentos contingentes, cada um com sua causa individual, em que a causa do próprio concurso ou interferência é, por isso mesmo, indeterminada. Por outras palavras, o acaso que assim se afirma é um acaso

com uma existência inegável e objectiva, representando "a ideia de um encontro entre factos racionalmente independentes uns dos outros, encontro que é em si próprio puro facto ao qual não podemos atribuir nem lei, nem razão" nem, conseqüentemente, prever (45).

Nesta acepção, o acaso aparece-nos como uma coincidência não teleológica e uma irregularidade factual surgida no seio da regularidade, devido ao embate de duas ou mais séries fenoménicas autónomas, com carácter **não-repeticional**. O indeterminismo do mundo quântico não se reduz a mera questão da capacidade de conhecimento a que a onisciência de um qualquer demónio laplaciano, capaz de comportar todas as leis universais, bem como todas as condições iniciais relevantes e todos os métodos de cálculo lógico-matemático, para todo e qualquer sistema, retiraria todo o sentido. Não. Nenhum sistema físico pode ser completamente previsto a partir de dentro, com qualquer grau especificado de precisão, independentemente da capacidade cognoscitiva, mesmo que infinita, do observador que sobre ele se debruça, porque o domina o acaso, fortuito e imprevisível, cuja "lei" por que se rege não pode ser definida senão em termos de probabilidades. A mecânica clássica não comporta, todavia, tal tipo de lei, pois que na mecânica clássica, quando se formula uma lei, postula-se "ipso facto" e no mesmíssimo instante, o determinismo. Nela, não se prova o determinismo provando a lei, pois ela própria é já o determinismo aceite (46). A formulação de leis científicas com valor meramente probabilístico implicava a reformulação do próprio conceito de lei.

Porque não possuímos o absoluto do saber, não só por limitação da nossa capacidade de intelecção e conhecimento, mas também por que a realidade fenoménica comporta dados variados sem conexão causal, a nossa previsão torna-se meramente probabilística; a lei torna-se antes hipótese útil de trabalho cuja validade reside numa contínua repetição verificada, isto é, na frequência da sua confirmação pelos fenómenos naturais.

Por isso Karl Popper afirma que "o argumento decisivo a favor do indeterminismo é a existência do próprio conhecimento racional"; "a progres-

siva racionalização do mundo – a tentativa de agarrar o mundo na rede do conhecimento – tem limites, a qualquer momento, no próprio conhecimento do conhecimento que também é, é claro, um processo que pertence ao mundo" (47). Uma inteligência infinita, no seu exame exaustivo do mundo, poderia produzir uma rede mais apurada, mas nem por isso poderia atingir o limite último da malha possível, que também ele se estende até ao infinito.

Ao afirmar a "lei" como hipótese de trabalho que tira a sua validade de uma contínua repetição verificada, a ciência que com este tipo de leis se faz, é ela própria uma ciência aberta, feita de teorias em joeiração permanente e em controvérsia que busca detectar seus erros e reduzir o seu campo de ignorância. Feitas de racionalismo crítico, céptico e experimentalista, as coordenadas da ciência que leva em conta o indeterminismo não são de molde a ser garante daquele tipo de certeza que só a fé pode assegurar ao homem. A ciência é, como o universo cuja inteligibilidade tenta abarcar, **uma ciência aberta** (48). A Natureza recusa exprimir-se na linguagem que qualquer tipo de regras confinadas a um paradigma rigoroso e estrito supõem e, conseqüentemente, de geração em geração, a ciência está sujeita a contínua mutabilidade, nem necessariamente irreversível, nem necessariamente unidireccional.

Ao aceitar o acaso reinante no comportamento mais íntimo da matéria, a ciência do século XX que havia já resolvido até aos alicerces os conceitos de tempo e espaço, de éter e de inércia, de massa e gravitação, estendeu a sua revolução aos conceitos de lei e de causa. Porque todo o determinismo dissimula uma real indeterminação existente no microcosmos dos quanta, as leis físicas não traduzem o conhecimento exacto das causas dos fenómenos naturais a que se referem. Nem por isso deixam de os representar cabalmente no domínio da escala macroscópica; não comportam a individualidade e isolabilidade das partículas, mas conjuntos estatísticos das mesmas. Nem por isso a ciência que sobre elas assenta perde a sua validade ou se revela menos útil e necessária na sua missão de conhecimento da Natureza.

NOTAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) Gen. I, 26-29.
 (2) Aristóteles, **De Coelo**, Lib. II, Lect. 26, parags. 101-102; Manuel de Gois, **Commentarii Collegii Conimbricensis Societatis Jesu in Quatro Libros de Coelo Aristotelis Stagiritae**, Lisboa, 1593, pg. 335.
 (3) I. Prigogine e I. Stengers, **A Nova Aliança**, Ed. Gradiva, Lisboa, 1987, Col. Ciência Aberta, 14, pg. 128.
 (4) Nicolau de Cusa, **De Docta Ignorantia**, Liv. II, Cp. II, pp. 99 ss in *Opera Omnia*, Ed. E. Hoffman e R. Klibansky, Vol. I, Lipsiae, 1932.
 (5) A. Koyré, **Do Mundo Fechado ao Universo Infinito**, Ed. Gradiva, Lisboa, Col. Trajectos, 6, pp. 13-14.
 (6) João C. Espada, **Liberdade ou Virtude** in *Revista Expresso*, 14 Março 1987, 47-R.
 (7) A. Koyré, **O. Cit.**, pg. 7.
 (8) Nicolau de Cusa, **O. Cit.**, Liv. II, Cp. II, pg. 105.
 (9) **Ibidem**, pg. 104.
 (10) Giordano Bruno, **Acerca do Infinito, do Universo e dos Mundos**, Ed. Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1958, Arg. Diálogo V, pg. 20.
 (11) **Ibidem**, pg. 36.
 (12) (a) Steven J. Dick, **Plurality of Worlds. The origins of the extraterrestrial life debate from Democritus to Kant**, Cambridge University Press, Cambridge, 1982; (b) Michael J. Crowe, **The Extraterrestrial Life Debate, 1750-1900: The Idea of a Plurality of Worlds from Kant to Lowell**, Cambridge University Press, Cambridge, 1986; (c) James Trefil, **Alone in the Universe** in *Sciences*, vol. 23, 1983, pp. 16-19.
 (13) Sir Richard Bentley, **Eight sermons preach'd at the Honourable Robert**

Boyle Lecture in the First Year MDCXCII, Londres, 1963.

(14) Giordano Bruno, **Spaccio de la Bestia Trionfante**, Stampato in Parigi, Londres, 1584; **De Gl' Heroici Furori**, Parigi, Appresso Antonio Baio, 1585.

(15) Emile Namer, **L'Univers de Giordano Bruno et la Destinée Humaine** in *L'Univers à la Renaissance, Microcosme et Macrocosme*, Presses Univ. de Bruxelles, Bruxelles, 1970, pp. 89-120.

(16) J. Kepler, **De Stella Nova in Pede Serpentarii**, Ed. Praga, 1606, cp. XXI, pg. 691.

(17) J. Kepler, **Epitome Astronomiae Copernicanae** in *Opera Omnia*, Ed. Frisch, Frankfurt et Erlangae, vol. VI, 1859, Part. II, pg. 138.

(18) Galileu-Galilei, **Lettera a Ingoli** in *Opere*, Ed. Naz. Vol. VI, Florença, 1896, pp. 518 e 529.

(19) Galileu-Galilei, **Diálogo sobre os Dois sistemas do mundo** in *Opere*, Ed. Naz., Vol. VII, Florença, 1897, pg. 315.

(20) Galileu-Galilei, **Lettera a Liceti** in *Opere*, Ed. Naz., Vol. XVIII, Florença, 1906, pp. 293ss.

(21) R. Descartes, **Principia Philosophiae** in *Oeuvres*, Ed. Adam-Tannery, Vol. VIII, Paris, 1905, Part. II, parag. 4, pg. 42.

(22) R. Descartes, **Ibidem**, Part. II, parag. 21, pg. 52.

(23) **Ibidem**, Part. II, parag. 27, pg. 55.

(24) **Ibidem**, Part. II, parag. 27, pg. 55.

(25) **Ibidem**, Part. I, parag. 26, pg. 54.

(26) I. Bernard Cohen, **O Nascimento de uma Nova Física**, Ed. Gradiva, Col. Trajectos, 10, Lisboa, 1988, pg. 198.

(27) **Four Letters from Sir Isaac Newton to the Reverend Dr. Bentley**, carta I, Londres, 1756, pp. 203ss.

(28) Steven Weinberg, **Os Três Primeiros Minutos**, Ed. Gradiva, Col. Ciência Aberta, 20, Lisboa, 1987, pp. 188-189; Robert Smith, **The Expanding Universe. Astronomy's 'great debate' 1900-1931**, Cambridge University Press, Cambridge, 1982.

(29) G. Gamow, (a) **The Creation of the Universe**, Viking Press, New York, 1952; (b) **My World Line**, Viking Press, New York, 1970.

(30) P. Vicentio Arcidiacono, **Origem e Evolução do Universo segundo G. Lemaître**, Braga, 1958, pg. 6.

(31) **Ibidem**, pg. 21.

(32) H. Bondi, **Cosmology**, Cambridge University Press, Cambridge, 1960; Fred Hoyle, (a) - **The Nature of the Universe**, Oxford, 1950; (b) - **Galaxies, Nuclei and Quasars**, Heineman, Londres, 1965; (c) - **From Stonehenge to Modern Cosmology**, Freedman, S. Francisco, 1972; (d) - O

Universo Inteligente, Ed. Presença, Lisboa, 1984.

(33) **The Born-Einstein Letters**, New York, 1971, pg. 221.

(34) Karl R. Popper, **Universo Aberto, Argumentos a Favor do Indeterminismo**, Publ. D. Quixote, Col. Opus, 6, Lisboa, 1988, pp. 24-25.

(35) **Ibidem**, pg. 25.

(36) Karl R. Popper, (a) - **The Logic of Scientific Discovery**, Hutchinson, Londres, 1959; (b) - **Sociedade Aberta, Universo Aberto**, Publ. D. Quixote, Col. Opus, 4, Lisboa, 1988.

(37) Heinz R. Pagels, **O. Cit.**, pp. 76-77.

(38) Karl R. Popper, **Universo Aberto**, pp. 123-125.

(39) Sir A. S. Eddington, (a) - **The Nature of Physical World**, Cambridge University Press, Cambridge, 1932, pp. 293ss; (b) - **Stellar Movement and the Structure of the Universe**, MacMillan and Cie., Londres, 1914; (c) - **The Expanding Universe**, Ann Arbor Paperback, Univ. Michigan Press, Michigan, 1958.

(40) Heinz R. Pagels, **O. Cit.**, pp. 76-77; 112-120; 220-226.

(41) J. Wheeler citado in H. Pagels, **O. Cit.**, pg. 113.

(42) Heinz R. Pagels, **O. Cit.**, pp. 221-226.

(43) Einstein supôs que tinha um relógio dentro de uma caixa fechada à prova da luz, com a possibilidade de abrir e fechar muito rapidamente um orifício nessa caixa. Dentro da mesma caixa ter-se-ia também um gás de fotões. Quando se abrisse o orifício, um só fotão sairia da caixa. Pesando a caixa antes e depois da abertura do orifício seria possível determinar a massa e, consequentemente, a energia do fotão que saía. Seria assim possível determinar simultaneamente e com a precisão desejada a energia e o instante de saída do fotão (cf. Heinz R. Pagels, **O. Cit.**, pg. 115).

(44) Sílvio Lima, **O Determinismo, o Acaso e a Previsão na História**, Coimbra Editora, Col. Universitatis, 22, Coimbra, 1958, pp. 17-19.

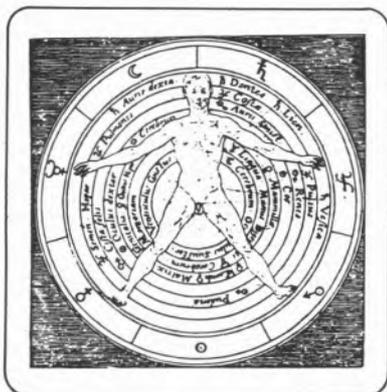
(45) **Ibidem**, pg. 17.

(46) **Ibidem**, pg. 19.

(47) Karl R. Popper, **Universo Aberto**, pg. 89.

(48) I. Prigogine e I. Stengers, **O. Cit.**, pp. 387ss.

* Dept. Química - Universidade
3000 Coimbra



Psychro

Programa para a Determinação de Propriedades Psicrométricas do Ar

MARIA MANUEL SÁ *
ALBERTO M. SERENO **

O conhecimento das propriedades psicrométricas de misturas de vapor de água com ar pode ser obtido a partir de relações e modelos. O programa PSYCHRO fá-lo de forma completa, baseando-se nas equações de Geankopolis.

1 - INTRODUÇÃO

No projecto e operação de grande número de processos laboratoriais e industriais tais como o condicionamento de ar, a secagem e armazenamento de produtos, a evaporação e o arrefecimento de água, etc., é necessário conhecer diversas propriedades termodinâmicas de misturas de vapor de água com ar. Estas propriedades, ditas psicrométricas, são tradicionalmente obtidas em cartas ou tabelas de manuseamento pouco cómodo e geralmente restringidas à pressão atmosférica normal.

Contudo, é sabido que as mesmas propriedades podem ser facilmente calculadas a partir de relações e modelos termodinâmicos. A aplicação da regra das fases de Gibbs permite concluir imediatamente que fixadas três propriedades intensivas do sistema é possível calcular qualquer outra propriedade. É isto que se propõe com o programa PSYCHRO onde todas as relações necessárias ao cálculo das propriedades psicrométricas do ar húmido foram integradas num programa de computador que dispõe de uma interface interactiva que facilita a comunicação com o utilizador.

2 - CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

A água pode existir em três estados físicos diferentes: sólido (gelo), líquido, e gasoso (vapor) dependendo da pressão e temperatura. Na Figura 1 está esquematizado o diagrama Pressão-Temperatura para a água, onde estão assinaladas as áreas

correspondentes a cada uma daquelas fases.

Para um sistema constituído por ar (suposto uma mistura de gases em proporções fixas e por isso tratado como um único composto) e vapor de água em equilíbrio, a bem conhecida regra das fases de Gibbs permite concluir que são três os graus de liberdade existentes ($2 \text{ componentes} - 1 \text{ fase} + 2 = 3$). Isto significa que uma vez fixadas quaisquer três propriedades intensivas do sistema este fica completamente definido, sendo então possível calcular qualquer outra propriedade intensiva de interesse.

As propriedades mais relevantes do sistema ar-vapor para os processos tecnológicos inicialmente apontados, adiante definidas, são:

- T_a - temperatura seca, [°C]
- T_w - temperatura húmida, [°C]
- P_t - pressão total, [bar]
- P_a - pressão parcial de água no ar, [bar]
- P_{va} - pressão de vapor da água, [bar]

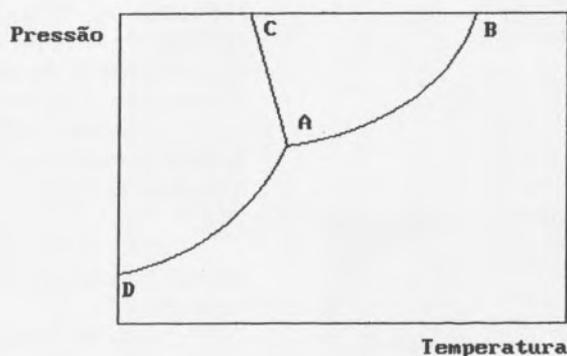
- Y_a - conteúdo de humidade, [Kg H_2O /Kg ar seco]
- Y_s - conteúdo de humidade na saturação, [Kg H_2O /Kg ar seco]
- y - humidade relativa
- Y - percentagem de saturação
- C_h - Calor específico do ar húmido, [KJ/Kg ar seco]
- V_h - Volume específico do ar húmido, [m³/Kg ar seco]
- H - Entalpia total de ar húmido, [KJ/Kg ar seco]
- H_v - Calor latente de vaporização da água à temperatura T_a , [KJ/Kg ar seco]

Na definição destas propriedades foram usadas como unidades de pressão o [bar] e de temperatura o [°C], por serem estas as unidades mais usadas na indústria. Para as restantes grandezas foram usadas unidades do Sistema Internacional de Unidades.

3 - EQUAÇÕES PSICROMÉTRICAS

Geankopolis (1983) indica um conjunto de equações, abaixo descri-

Fig. 1 - Representação esquemática do diagrama P-T da água



Ao longo das linhas AB, AC, AD, coexistem as fases líquida e vapor, líquida e sólida e, sólida e vapor, respectivamente. O ponto A é designado por ponto triplo (1E-2°C, 6.11E-3 bar).

tas, que permitem calcular as propriedades psicrométricas e fazer a consequente caracterização de sistemas vapor de água/ar. Para a derivação das referidas equações, foi suposto que o ar tem comportamento ideal.

O conteúdo de humidade, Y_a , de uma mistura vapor de água/ar é definida como a massa de água existente na unidade de massa de ar seco. Esta propriedade, assim definida, depende somente da pressão parcial de vapor de água no ar e da pressão total. Conhecendo o peso molecular da água - 18.02 e do ar seco - 28.97, o conteúdo de humidade do ar seco pode ser calculado por:

$$Y_a = \frac{18.02}{28.97} \cdot \frac{P_a}{P_t - P_a} \quad (1)$$

Sabendo que no ar saturado o vapor de água está em equilíbrio com água líquida, a pressão parcial de água no ar é nessas condições igual à pressão de vapor de água pura à mesma temperatura. O conteúdo de humidade nas condições de saturação será dado então por:

$$Y_s = \frac{18.02}{28.97} \cdot \frac{P_{va}}{P_t - P_{va}} \quad (2)$$

podendo a pressão de vapor ser estimada pela equação de Antoine:

$$Y_a [\text{bar}] = \frac{1.01325}{760} \times \frac{A - \frac{B}{C + T[^\circ\text{C}]}}{10} \quad (3)$$

com $A=8.079$, $B=1733.926$ e $C=233.665$ (Ohe, 1976).

A percentagem de saturação, Y , é definida por:

$$Y = 100 \cdot \frac{Y_a}{Y_s} \quad (4)$$

e a humidade relativa por:

$$y = 100 \cdot \frac{P}{P_{va}} \quad (5)$$

O calor húmido é definido aqui como a quantidade de calor necessária para elevar de 1°C a temperatura de um quilograma de ar seco e respectivo vapor de água presente. De acordo com Geankopolis (1983), tomando valores médios constantes dos calores específicos do ar e do vapor de água para a gama de temperatura geralmente utilizada, aqui considerada de 0 a 200°C , pode escrever-se:

$$C_h [\text{KJ/Kg/K}] = 1.05 + 1.88 Y_a \quad (6)$$

Quanto ao volume específico de uma mistura de vapor de água/ar, pode ser estimado por (Geankopolis, 1983):

$$V_h = (2.83E-3 + 4.56E-3 Y_a) \cdot T_a \quad (7)$$

A entalpia total de um quilograma de ar seco e respectivo vapor de água nele contido, referida à temperatura base, $T_o = 0^\circ\text{C}$ e à água no estado líquido, será:

$$H = (1.005 + 1.88 Y_a) \cdot T_a + 2501.4 Y_a \quad (8)$$

Fazendo um balanço energético a uma câmara de saturação adiabática e supondo que a razão psicrométrica de uma mistura vapor de água/ar é aproximadamente igual ao calor húmido (Geankopolis, 1983), obtém-se a relação:

$$\frac{Y_a - Y_s}{T_a - T_w} = \frac{-(1.005 + 1.88 Y_a)}{H_v} \quad (9)$$

em que H_v é a entalpia de vaporização da água, função da temperatura.

Este pode ser comodamente calculado através de um ajuste polinomial de valores experimentais. Utilizando a tabela de entalpias de vaporização da água apresentados por Perry e Chilton (1973), obtém-se uma relação válida para a gama de temperaturas de 0 a 200°C :

$$H_v = 2.498 \times 10^3 - 2.049 \cdot T_a - 3.633 \times 10^{-3} \cdot T_a^2 \quad (10)$$

O conjunto das equações acabadas de descrever formam um sistema de dez equações a treze incógnitas, sendo então três o número de graus de liberdade como havia sido previsto pela regra de Gibbs. Especificadas três propriedades intensivas independentes, o programa PSYCHRO calcula as restantes.

4 - DESCRIÇÃO DO PROGRAMA PSYCHRO

Com base nas equações acima estabelecidas, foi desenvolvido o programa PSYCHRO. O programa foi escrito em Fortran 77 (MS-Fortran v. 4.0) e é capaz de funcionar em qualquer microcomputador tipo XT ou AT operando sob MS-DOS.



Fig. 2 - Menu de apresentação

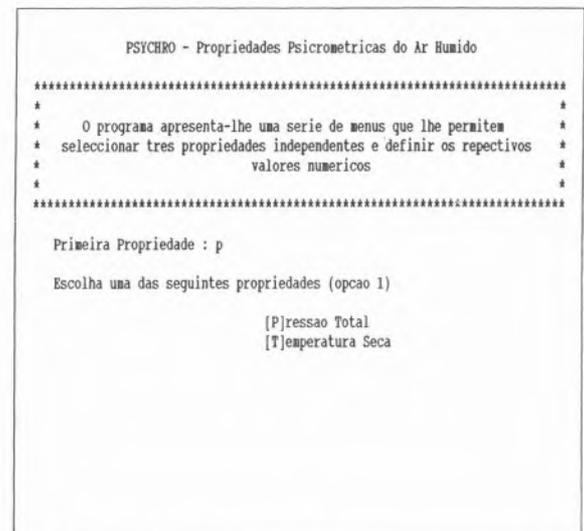


Fig. 3 - Selecção de primeira propriedade

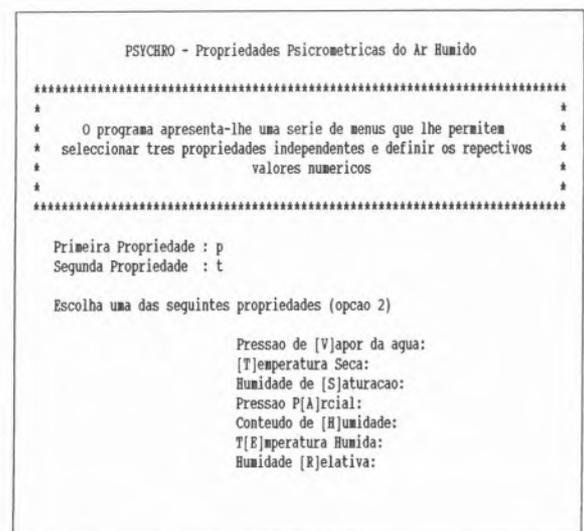


Fig. 4 - Selecção de segunda propriedade

```

PSYCHRO - Propriedades Psicrometricas do Ar Humido
*****
*
* Indique os valores conhecidos das tres propriedades seleccionadas *
*
*****

Valor da Pressao Total (bar): 1
Valor da Temperatura Seca (graus C): 60
Valor da Temperatura Humida (graus C): 30
    
```

Fig. 5 - Selecção da terceira propriedade

```

PSYCHRO - Propriedades Psicrometricas do Ar Humido

RESULTADOS CALCULADOS

As propriedades para uma mistura vapor de agua/ar nas condicoes
especificadas sao:

Pressao Total (bar) = 1.000
Pressao Parcial de Agua no Ar (bar) = .023
Pressao de Vapor da Agua (bar) = .199
Temperatura Seca (graus C) = 60.000
Temperatura Humida (graus C) = 30.000
Conteudo de Humidade do Ar (Kg H2O/Kg ar seco) = .014
Humidade de Saturacao (Kg H2O/Kg ar seco) = .155
Humidade Relativa (%) = 11.390
Calor Especifico do Ar Humido (KJ/Kg ar seco) = 1.032
Volume Especifico de Ar Humido (m3/Kg ar seco) = .964
Entalpia Total de Ar Humido (KJ/Kg ar seco) = 98.067
Percentagem de Saturacao (%) = 9.332
Calor Latente de Vaporizacao (KJ/Kg ar seco) = 2361.317

Prima RETURN para terminar
    
```

Fig. 6 - Entrada dos valores das propriedades seleccionadas

```

PSYCHRO - Propriedades Psicrometricas do Ar Humido
*****
*
* O programa apresenta-lhe uma serie de menus que lhe permitem *
* seleccionar tres propriedades independentes e definir os respectivos *
* valores numericos *
*
*****

Primeira Propriedade : p
Segunda Propriedade : t
Terceira Propriedade : w

Escolha uma das seguintes propriedades (opcao 3)

Pressao P[ar]cial:
Conteudo de [H]umidade:
T[em]peratura Humida:
Humidade [R]elativa:
    
```

Fig. 7 - Resultados calculados

O programa tem uma estrutura modular e é constituído pelas seguintes subrotinas.

Programa PSYCHRO - Programa principal.

Subrotina INPDAT - Faz a lista das propriedades do ar consideradas por PSYCHRO.

Subrotina PSYCO - Permite ao utilizador seleccionar quais as três propriedades conhecidas e indicar os respectivos valores.

Subrotina SUBS - Calcula as propriedades termodinâmicas usando as Equações 1 a 10.

Subrotina OUTDAT - Lista os valores calculados das propriedades desconhecidas.

Subrotina SCREEN - Responsável pela comunicação com o monitor.

Durante a execução, vão surgindo menus detalhados que tornam a sua utilização transparente e dispensam experiência anterior com meios computacionais.

No programa PSYCHRO foram adoptadas algumas hipóteses, já referidas, nomeadamente: (i) comportamento ideal do ar; (ii) razão psicrométrica igual ao valor de calor húmido, ou seja, no diagrama humidade/temperatura as linhas de saturação adiabática coincidem com as linhas de igual temperatura húmida; (iii) as equações 3 e 10 são válidas apenas na gama 0 °C a 200 °C; o próprio programa alerta o utilizador para este facto caso seja introduzido um valor fora desta gama. Cópias do programa PSYCHRO podem ser obtidas junto dos autores. O programa faz também parte da programoteca da SPQ.

5 - EXEMPLO DE UTILIZAÇÃO

Problema: Dadas três propriedades psicrométricas, Pressão total, Temperatura seca e Temperatura húmida, pretende-se conhecer os valores das restantes propriedades.

$$P_t = 1 \text{ bar}; T_a = 60 \text{ }^\circ\text{C}; T_w = 30 \text{ }^\circ\text{C}$$

Para correr o programa bastará escrever a palavra PSYCHRO como resposta ao "prompt" do computador. O programa apresenta uma série de menus (Figuras 2 a 7) onde se podem seleccionar três propriedades independentes conhecidas, fixar os correspondentes valores numéricos e obter de seguida os valores das restantes propriedades.

NOMENCLATURA

A, B, C - Constantes da Eq. de Antoine

C_h - Calor específico do ar húmido, [KJ/Kg ar seco]

H - Entalpia total de ar húmido, [KJ/Kg ar seco]

H_v - Calor latente de vaporização da água à temperatura T_a , [KJ/Kg ar seco]

P_a - pressão parcial de água no ar, [bar]

P_t - pressão total, [bar]

P_{va} - pressão de vapor da água, [bar]

T_a - temperatura seca, [°C]

T_o - temperatura base para o cálculo de entalpia, [°C]

T_w - temperatura húmida, [°C]

V_h - Volume específico de ar húmido, [m³/Kg ar seco]

Y - percentagem de saturação

Y_a - conteúdo de humidade, [Kg H₂O/Kg ar seco]

Y_s - conteúdo de humidade na saturação, [Kg H₂O/Kg ar seco]

y - humidade relativa

REFERÊNCIAS

Ohe, S., 1976, "Computer Aided Data Bank of Vapor Pressure" Data Book Publ. Comp., Tokyo.

Geankopolis, C. J., 1983, "Transport Process and Unit Operations" 2nd Ed., Allyn & Bacon, Inc., Newton Mass.

Perry & Chilton, 1973, "Chemical Engineers Handbook" 5th Ed., Mc Graw-Hill.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio financeiro da JNICT - Junta Nacional de Investigação Científica e Tecnológica através do programa JNICT/FSE.

* Eng.^ª Química, Bolseira da JNICT/CIÊNCIA na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

** Eng.^º Químico, Prof. Auxiliar da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

O Carbono

J. A. MARTINHO SIMÕES *

Nesta rubrica do *Química* falaremos de moléculas, sem qualquer ordem pré-estabelecida ou critério de selecção especial. Escolheremos moléculas simples e complexas, triviais e exóticas, radicais, iões. Será como fazer uma colecção de objectos determinada apenas pelo gosto do coleccionador. Resta acrescentar que nos inspirámos no livro *Molecules*, de Peter W. Atkins (Scientific American Library, 1987), uma viagem inesquecível guiada por um dos melhores divulgadores científicos contemporâneos.

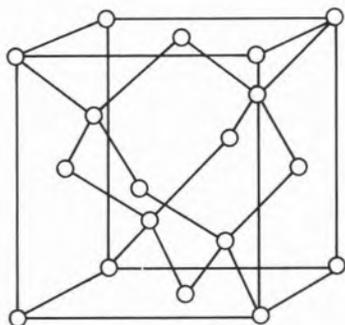


Fig. 1 - Célula unitária do diamante

Tudo o que é simples, porque é simples, excita o interesse e a imaginação das pessoas. E, em Química, nada existe mais simples que as moléculas e as estruturas constituídas por um só elemento. Os metais nobres, os gases raros, o mercúrio, o hidrogénio, o oxigénio, o ozono, o azoto, o iodo, o diamante, a grafite são algumas das poucas substâncias que giram (e são razoavelmente compreendidas) na linguagem corrente. Em boa verdade, poucos saberão, no entanto, que as duas últimas são constituídas pelo mesmo elemento, o carbono, e que a dureza, o brilho, a transparência, o fascínio do diamante, e a suavidade ao tacto, a opacidade, a cor negra metálica, o plebeísmo da grafite, resultam apenas de dois modos

diferentes de os átomos de carbono assegurarem a satisfação da sua valência: cada átomo tem a capacidade para se ligar a quatro outros átomos. Os quatro electrões na camada periférica do carbono, pelo facto de se encontrarem na proximidade do núcleo, originam ligações C-C e C-H fortes e estruturas estáveis. O carbono é a base da vida e não, por exemplo, o silício, cujas ligações Si-Si e Si-H são substancialmente mais fracas.

No caso do diamante, como se mostra na Figura 1, a estrutura da célula unitária é cúbica: existe um átomo de carbono em cada vértice e no centro de cada face e, no interior do cubo, situam-se quatro outros átomos que são o centro de igual número de tetraedros. A repetição tridimensional desta célula tem o aspecto mostrado na Figura 2, onde se pode notar que cada camada de hexágonos é perpendicular à diagonal do cubo da Figura 1. Deste modo o carbono satisfaz a sua valência, através de hibridações sp^3 . A rigidez desta estrutura, bem como as fortes ligações entre os átomos de carbono, é responsável pela enorme dureza do diamante. A estrutura em camadas observa-se também na grafite (Figura 3), mas aqui estas são planas e a célula unitária é hexagonal. A valência dos átomos de carbono é satisfeita num único plano por hibridações sp^2 , tal como no benzeno ou no etileno, não havendo pois necessidade de recorrer a novos átomos acima ou abaixo desse plano. Por outras palavras, pode considerar-se que cada carbono se liga a outros dois por ligações simples e a um terceiro por uma ligação dupla. Assim, teoricamente poderíamos conceber a grafite como uma folha finíssima, com a espessura de um átomo. Na prática observam-se várias camadas, separadas cerca de 335 picómetros ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$), distância que é suficientemente grande para que interacção entre elas seja pequena – ao contrário das ligações carbono-carbono na mesma camada, que são bem mais fortes que as do próprio diamante. É às ligações fracas entre as

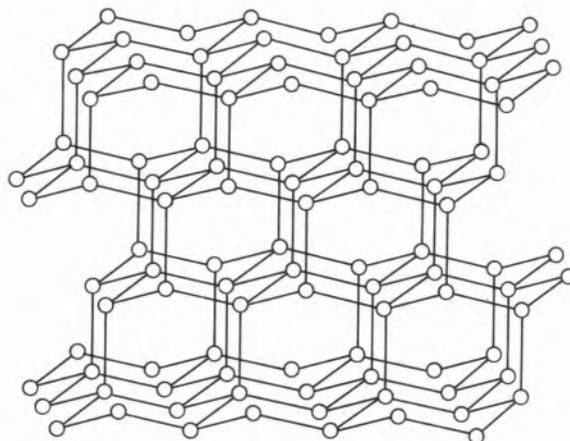


Fig. 2 - Repetição tridimensional da célula unitária do diamante

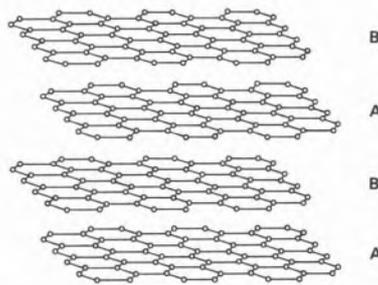


Fig. 3 - Estrutura tridimensional da grafite

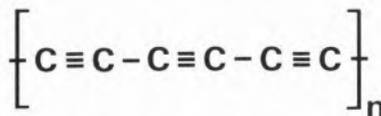


Fig. 4 - Poliacetileno

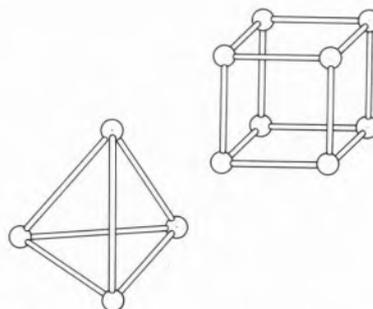


Fig. 5 - Duas possíveis estruturas das moléculas C_4 e C_4

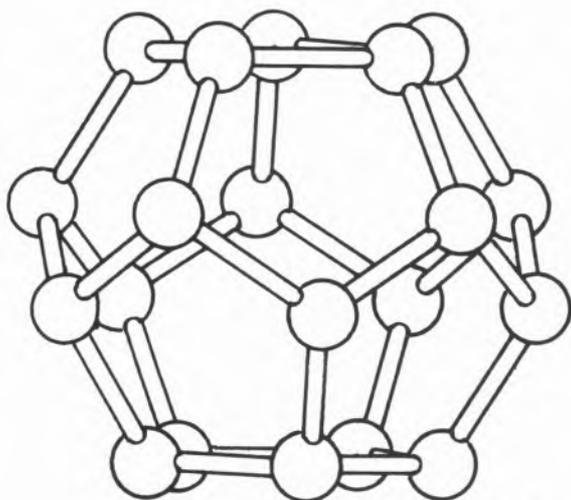


Fig. 6 - Estrutura mais estável da molécula C_{20} (adaptado de V. Parasuk, J. Almlöf, *Chem. Phys. Lett.* 1991, 184, 187)

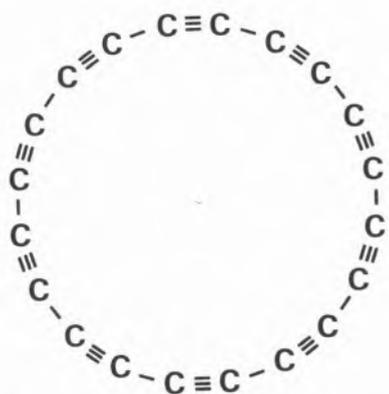


Fig. 7 - Outra estrutura possível, poliacetilénica, para a molécula C_{20}

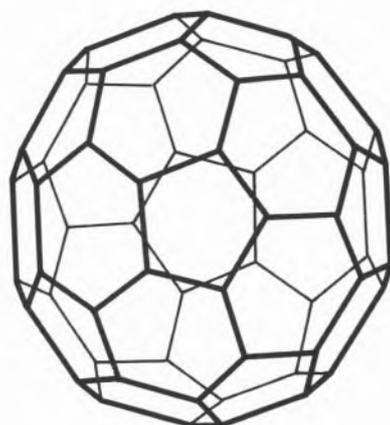


Fig. 8 - A molécula C_{60} - o buckminsterfulereno ou futeboleno

camadas, o que permite a sua fácil separação, que se atribui a origem da pequena dureza e das propriedades lubrificantes da grafite.

IMAGINAÇÃO LIMITADA

A ideia da existência de grafite constituída por uma única camada é disparatada porque essa folha tenderia a dobrar-se como uma tira de papel comprimida a partir dos extremos. Na dobras, a tensão exercida nas ligações químicas seria enorme e estas facilmente partiriam. Poderíamos, no entanto, imaginar que cada camada se enrolaria de forma cilíndrica, com uma estrutura semelhante a cigarros ocos de um maço. Aparentemente isto também não traz vantagens do ponto de vista energético, uma vez que, por maior que fosse o raio dos cilindros, aumentar-se-ia a tensão das ligações químicas (uma hibridação sp^2 implica que os três átomos ligados ao central se situem num plano) relativamente à estrutura da Figura 3 (raio infinito).

A nossa imaginação sobre possíveis estruturas do carbono tem sido limitada por três factores. Primeiro, nem só o que é mais estável existe: basta que a transformação *fase instável* \rightarrow *fase estável* seja inibida por uma enorme barreira de energia, para que o processo de conversão seja na prática irrealizável em condições normais. É o caso da transformação *diamante* \rightarrow *grafite*. Segundo, poderá haver mais possibilidades estruturais – embora talvez energeticamente menos favoráveis – de satisfazer a valência do carbono. Uma dessas possibilidades é imaginar uma estrutura do tipo acetilénico, em que os carbonos têm hibridação sp (cada átomo liga-se a dois outros, respectivamente através de uma ligação simples e de uma tripla). O poliacetileno, mostrado na Figura 4, é uma molécula que não é apenas produto desta especulação: tem propriedades de um condutor metálico.

TERCEIRO FACTOR

O terceiro factor que até agora não foi considerado prende-se com o número de átomos de carbono que constituem a molécula. O diamante e a grafite são entidades formadas por um número elevadíssimo de átomos e que só existem no estado sólido. Quais as

estruturas de agregados ou "clusters" de carbono de menor dimensão, ou seja o C_2 , o C_3 , o C_4 , etc.? Não é possível isolar muitas destas espécies, uma vez que têm um tempo de vida muito curto – são extremamente reactivas. Por isso mesmo, não é difícil adivinhar que as suas estruturas serão tais que a valência de um ou mais átomos de carbono não é satisfeita, logo reagem entre si ou com outras espécies (no fundo, esta é a razão por que os radicais livres, como o CH_3 , ou o C_6H_5 são tão reactivos – um dos átomos de carbono tem um electrão desemparelhado, ou uma valência livre), ou então as tensões que afectam as ligações químicas são tão elevadas que estas facilmente se quebram. Pensemos, por exemplo, nas moléculas C_4 e C_8 , cujas estruturas possíveis seriam as da Figura 5. Uma hibridação sp corresponde a ângulos de 120° entre as ligações ao átomo central. Nas estruturas da Figura 5 os ângulos são de 60° e 90° , respectivamente, ou seja as ligações são muito destabilizadas e podemos prevêêr que ambas as moléculas serão extremamente instáveis. O problema é minorado se em vez de quadrados pensarmos em pentágonos regulares, onde os ângulos são de 108° . A molécula de C_{20} (Figura 6), com os seus doze pentágonos, será por certo muito mais estável que as estruturas propostas para o C_4 e o C_8 . Claro que existem estruturas alternativas para as apresentadas, como por exemplo estruturas acetilénicas cíclicas (Figura 7) e *a priori* não é possível decidir quais as favorecidas do ponto de vista energético. Felizmente que a Química Computacional chegou a um estágio de desenvolvimento suficiente para nos dizer com uma certa segurança, que, por exemplo no caso da molécula C_{20} , a estrutura mais estável é a da Figura 6.

HISTÓRIA FASCINANTE

Se quisermos repetir o exercício anterior apenas com hexágonos – onde não há tensão nas ligações, uma vez que estas definem ângulos de 120° (recorde-se a estabilidade da grafite) – verificamos que é impossível definir uma superfície fechada. Nesta fase é melhor arranjarmos modelos moleculares simples (ou, na falta destes, pedaços de arame e bolas de plasticina ou ainda pedaços de cartão e uma boa

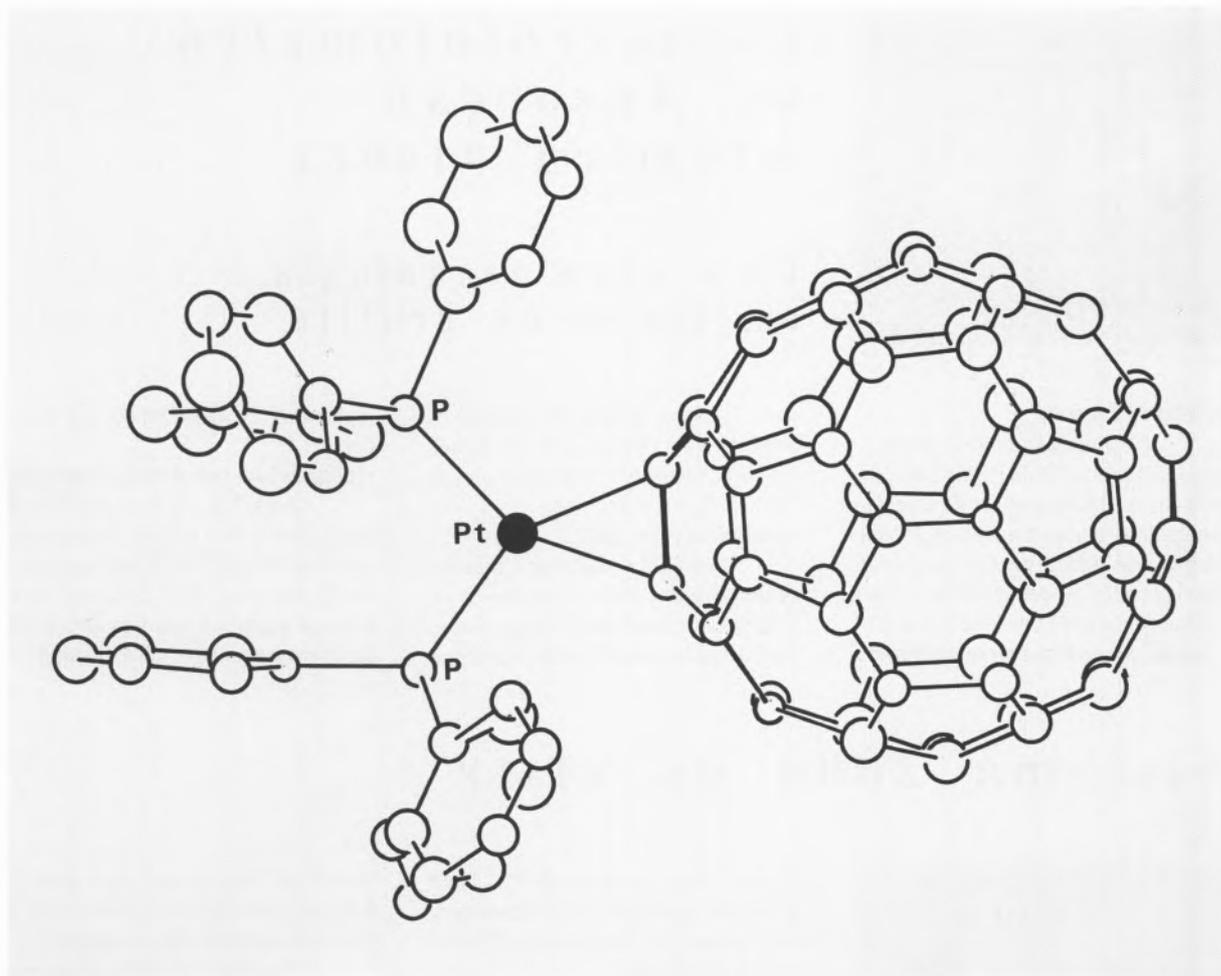


Fig. 9 - Estrutura do complexo $\text{Pt}(\text{PPh}_3)_2\text{C}_{60}$. O C_{60} tem uma ligação η^2 ao átomo de platina, tal como o etileno na molécula $\text{Pt}(\text{PPh}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_4)$. Adaptado de P. J. Fagan, J. C. Calabrese, B. Malone, *Science* 1991, 252, 1160.

dose de paciência). Poderemos concluir, de acordo com um teorema de Euler, que tal só é conseguido se na superfície forem incorporados 12 pentágonos e que 12 pentágonos e um só hexágono não podem também definir uma superfície fechada. Serão necessários quatro hexágonos e os doze pentágonos para obter o que se pensa ser a estrutura mais estável do C_{28} . E assim sucessivamente, C_{30} , C_{32} , C_{34} , até se chegar a C_{60} . Esta molécula (Figura 8) tem 20 hexágonos, para além dos doze pentágonos e não vale a pena perdermos tempo a construí-la com os nossos modelos: basta comprar uma bola de futebol e imaginar que o seu diâmetro é cerca de 700 pm, ou seja cerca de 10^{10} vezes menor.

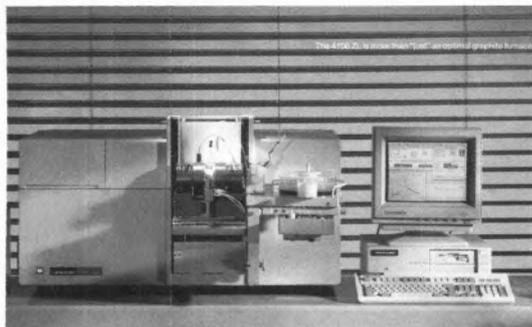
A descoberta do buckminsterfulereno, ou futeboleno, C_{60} (e de muitas mais moléculas da família dos fulerenos, assim chamados em homenagem ao arquitecto americano Buckminster Fuller) é uma história fascinante, com alguns ingredientes de romance policial. Harry Kroto, o autor

principal desta novela, escrevê-la-á, um dia, com todos os detalhes. Para já, podemos contentar-nos com o que é do domínio público – e já é bastante (ver literatura recomendada). O C_{60} , que foi pela primeira vez observado na forma iónica (C_{60}^+), na fase gasosa, obtido por evaporação de grafite com o auxílio de um laser pulsado (Kroto e colaboradores, 1985) e isolado como um sólido castanho escuro, solúvel em solventes orgânicos como benzeno ou tolueno (1990), deu origem a uma actividade que, no mínimo, se pode classificar de febril. São centenas os artigos publicados anualmente envolvendo membros da família dos fulerenos. Buscam-se as propriedades físicas destes compostos, estuda-se a sua reactividade (há já alguns compostos organometálicos incluindo o C_{60} como ligando, por exemplo o complexo $\text{Pt}(\text{PPh}_3)_2\text{C}_{60}$ - Figura 9), e investigam-se algumas das suas potenciais utilizações (o C_{60} dopado com potássio torna-se superconductor a 18 K).

Se quiser saber mais, existem numerosos artigos de revisão e de divulgação sobre o C_{60} e outros fulerenos, entre os quais podem destacar-se:

- H. W. Kroto, *Chemistry in Britain* 1990, 26, 40.
- H. W. Kroto, A. W. Allaf, S. P. Balm, *Chemical Reviews* 1991, 91, 1231.
- R. F. Curl, R. E. Smalley, *Scientific American* 1991 (Outubro).
- H. W. Kroto, *Angewandte Chemie (International Edition in English)* 1992, 31, 111.
- Número de Março de 1992 de *Accounts of Chemical Research*, sobre os fulerenos.

* Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico



Espectrofotómetro de Absorção Atómica 4100ZL

Uma nova tecnologia em forno de grafite

• **Efeito de Zeeman**

O espectrofotómetro de Absorção Atómica 4100ZL da Perkin Elmer é o primeiro a utilizar o efeito de Zeeman longitudinal (campo magnético paralelo ao percurso óptico) para correcção de "background", o que permite atingir limites de detecção excepcionais.

• **Aquecimento Transversal do Forno**

O aquecimento transversal do forno e a plataforma de L'Vov integrada no tubo garantem uma uniformidade térmica ao longo do forno.

• **Automatização Total**

O 4100ZL é totalmente automatizado e todos os componentes do sistema (espectrofotómetro, forno, "autosampler" e acessórios) são com-

pletamente controlados por computador.

• **Indispensável em Análise Ambiental**

Uma vez que o 4100ZL é compatível com o sistema de injeção em fluxo FIAS-200, da Perkin Elmer, para a determinação de mercúrio e hidretos, é possível analisar todos os elementos de interesse no controle ambiental.

Sistema 2000 de FT-IR



Flexibilidade de amostragem

O sistema 2000 da Perkin Elmer possui quatro feixes externos podendo cada um deles estar ligado a estações

de amostragem simples ou duplas. Cada uma das estações de amostragem pode, por sua vez, estar ligada a dois detectores em simultâneo.

Versatilidade óptica

Numa mesma unidade óptica de base é possível instalar novos componentes que permitem fazer análises por Raman, Cromatografia Gasosa, Termogravimetria e Microscopia.

Tratamento de Dados

Para além do software de base

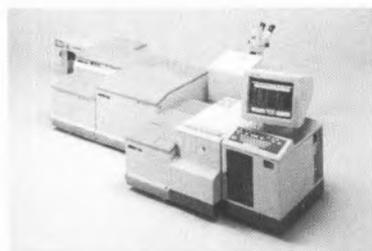
para PC-IRDM Release 2 - que permite todo o tratamento de dados de FT-IR, é possível adicionar outros módulos:

• **Search** - Para além da comparação com espectros de referência fornece informação estrutural sobre a molécula.

• **TR-IR** - Permite obter informação estrutural dependente do tempo (cerca de 20 espectros por segundo) o que é indispensável para estudos cinéticos, GC-IR e TG-IR.

• **Quant +** - Permite a análise quantitativa de multicomponentes.

Sistema 2000R - NEAR-IR-FT RAMAN



Flexibilidade de amostragem

Um compartimento de amostras amplo com ajuste X, Y, Z associado a

uma óptica de recolha permitem uma grande flexibilidade em termos de tamanho de amostra e dimensões da célula. Os dispositivos de amostragem permitem uma análise não destrutiva de amostras.

Versatilidade óptica

Através do teclado é possível fazer a excitação a 90° e a 180° e utilizando um laser polarizado pode-se obter informação estrutural impossível de conseguir com outro sistema.

Performance otimizada

A combinação dos espelhos revestidos a ouro, da óptica de recolha f/ 0.6, dos filtros de elevada eficiência e de um detector específico permite obter um sensibilidade nunca antes conseguida.

Para mais informações contactar:
 ILC - Instrumentos de Laboratório e Científicos, Lda.
 R. Dr. Álvaro de Castro, 77 - 1600 Lisboa
 Tel. 78 21 72 - Fax 793 70 35

Nova técnica analítica HPLC-GC (on-line) Dualchrom 3000

A FISONS Instruments acaba de lançar no mercado um novo e potente conjunto analítico que liga entre si as conhecidas técnicas de cromatografia líquida de alta precisão (HPLC) e a cromatografia em fase gasosa (GC), de maneira inteiramente automática.

Esta nova conjugação de técnicas, pode ainda ser acoplada à espectrometria de massa (HPLC-GC-MS) tornando-se assim num sistema analítico único de análise de matrizes complexas e que inclui "on-line" a preparação da amostra (parte HPLC) a separação (parte GC) e a identificação (parte MS).

O sistema permite atingir níveis de sensibilidade extremamente bons

pela transferência total e sem contaminações da fracção proveniente da separação/preparação de amostra por cromatografia líquida, para a parte de separação "fina" por cromatografia gasosa de alta resolução que utiliza detectores de alta sensibilidade e selectividade incluindo o detector de massa, quadrupolar.

As aplicações deste novo sistema repartem-se por vários campos como por exemplo:

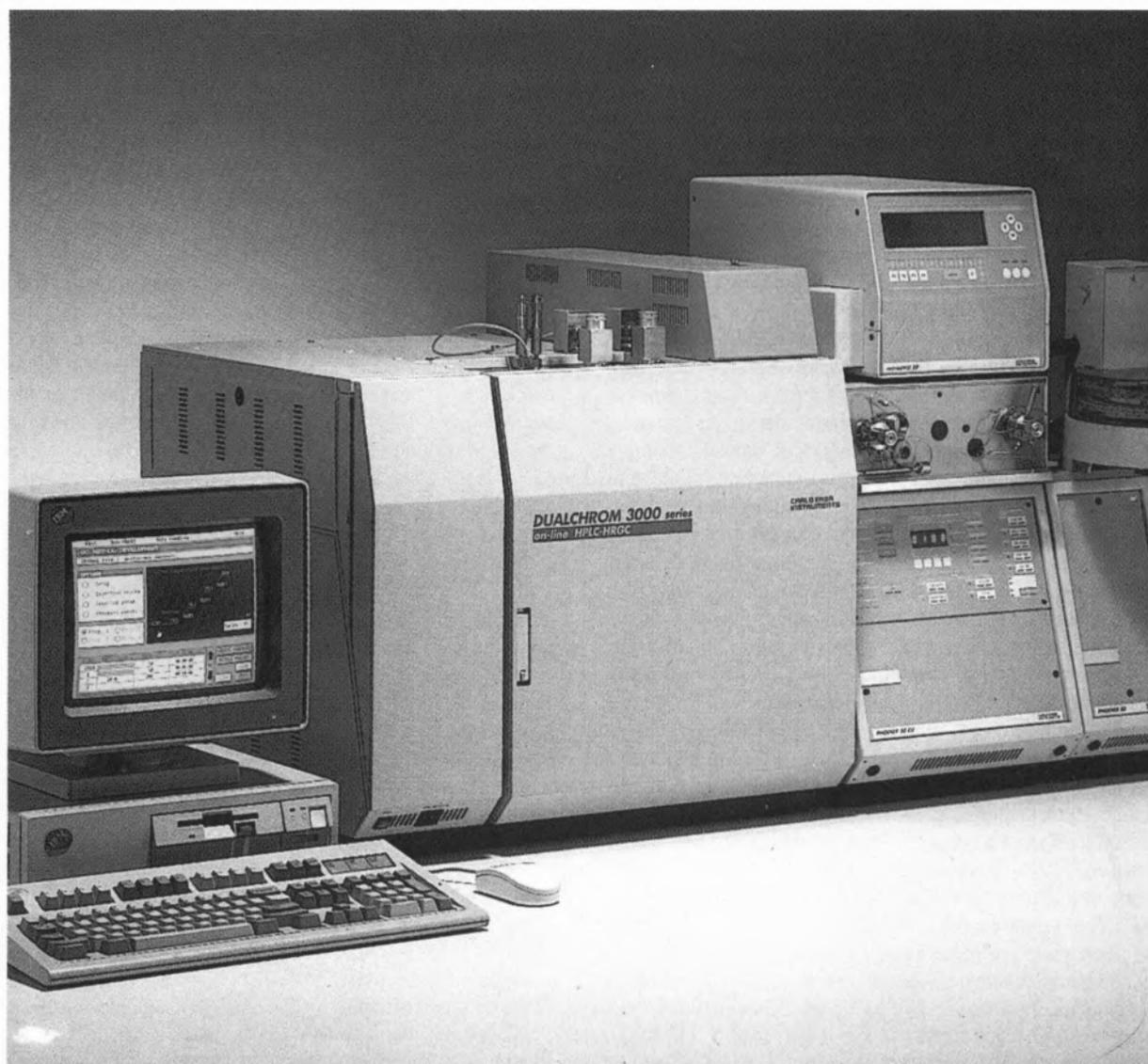
- Análise de óleos e combustíveis
- Análise de aromas e odorizantes utilizados em cosmética, indústria alimentar, etc.

- Análise de pesticidas em produtos alimentares e agrícolas em geral

- Análise de amostras biológicas e farmacêuticas

- Determinação de poluentes ambientais (PAC's, PCB's e pesticidas)

*Para mais informações contactar o distribuidor FISONS em Portugal: DIAS DE SOUSA LDA., Quinta da Piedade, lote 15, R/C, 2625 PÓVOA DE STA. IRIA
Tel.: 959 23 16 - Fax: 959 08 13*



Ciência, Pós-Ciência, Meta-Ciência



Solicitado para fazer breve recensão do livro **Ciência, Pós-Ciência, Meta-Ciência – Tradição, Inovação e Renovação** de Raquel Gonçalves¹, porque se trata de um livro situado na área disciplinar da História e Filosofia das Ciências, logo me vieram à mente as considerações que George Sarton oportunamente produziu sobre o assunto: antes de nos interrogarmos sobre como devemos fazer a recensão de um livro, será útil perguntarmo-nos algo mais fundamental – como deve ele ser lido?

Comece-se por apreciá-lo na íntegra, antes mesmo de o ler, mercê do índice elucidativo que todo o bom livro deve possuir; o índice nos dirá, não só o que contém o livro, como também como está distribuído seu conteúdo; a introdução nos explicará os objectivos e os métodos que o autor se propôs e usa; a bibliografia nos dará conta de suas

relações ideológicas.

Feita a apreciação prévia, a sua leitura saberá usar da arte que permitirá ao leitor julgar se deve ler tudo, ou se, com grande vantagem, deverá saltar sobre alguns parágrafos, ou mesmo algumas partes, para melhor absorver e se deter naquilo que constitui o seu verdadeiro miolo. E com essa mesma arte, saberá usar da velocidade adequada com que a leitura das diversas páginas deverá ser feita².

A leitura assim feita é por si só verdadeiro exame metódico do livro em causa, imprescindível à sua utilização inteligente. A recensão crítica mais não deve ser que apresentar a outros possíveis leitores do mesmo livro, os resultados desse exame metódico, criando neles, seja pela positiva, seja pela negativa, uma possível atitude de leitura.

Abrimos o livro de Raquel Gonçalves e sem esforço apercebemo-nos, num ápice, do seu conteúdo, mercê de um índice claro e pormenorizado, muito embora conciso. Numa só página, temos frente a nossos olhos, num único relance, em títulos elucidativos e bem ordenados, quanto nos é apresentado no interior, com maior ou menor desenvolvimento.

Na introdução, propõe-se a autora historiar o nascimento e os períodos revolucionários das ciências, e historiar também as várias vertentes do pensamento filosófico que, tendo por tema a ciência, maior influência exerceram no “pensar ciência” contemporâneo. E consegue levar a bom termo este seu objectivo, já informando, já

analisando reflexivamente, nas duas secções que à introdução se seguem, a parte de leão do livro. À boa laia de claro procedimento dialéctico, para bem poder falar do nascimento das ciências fundamentais (a Matemática, a Física, a Biologia e a Química) e das novas ciências (a Bioquímica, a Electrónica, a Cibernética, a Informática, a Engenharia Genética e a Microbiologia), das revoluções científicas que marcaram essa história, e da sua interacção com a Filosofia, não se eximiu a autora à obrigação de explicar o que se deva entender por ciência e também por Filosofia e Filosofia da Ciência ou Epistemologia. No princípio e no fim, indagação primeira e explicação última, está a Filosofia; investigação e encontro de verdades parcelares, a Ciência é um meio na procura da verdade absoluta do Homem e do Universo; e a Filosofia da Ciência debruça-se reflexivamente sobre o que a Ciência faz, remetendo-a para a indagação primeira e a explicação última da Filosofia: como se faz, para que se faz e porque se faz.

A História e a Filosofia da Ciência, ao confrontarem-se com a revolução científica de Planck e Einstein, afirmando não ser possível observar a natureza sem a perturbar, e mostrando que os acontecimentos que a ciência evoca dependem manifestamente do observador, questionaram o estatuto de conhecimento certo que à ciência havia sido reconhecido durante mais de vinte séculos, atirando o saber científico para uma atitude de pragmatismo. A relatividade da

verdade científica e, consequentemente, a sua mutabilidade, assegura a existência de observadores conscientes e justifica tanto a incredulidade como condição de crescimento da ciência, como a dialéctica universitária face ao binómio investigação-docência, e ainda toda a problemática em torno da legitimação dos enunciados científicos, a emancipação de novas ciências e, principalmente, o estreitamento de laços entre a Ciência e a Técnica. São as teias da pós-ciência e da meta-ciência.

A última secção do livro em análise mostra-nos que também a ciência em Portugal, do mesmo modo que a ciência além fronteiras, está enredada nessasteias, importando levantar-lhe o véu, para que o nosso olhar se aperceba que elas existem e precisam ser tratadas. Fazê-lo é tarefa nacional urgente, que a associação Ciência - Educação - Cultura não é um mito, nem o desenvolvimento harmónico do país se compadece com a sua falha.

De leitura agradável, o livro de Raquel Gonçalves deixa-nos com um clamor final nesse sentido. Não seja ele voz que brada no deserto.

A. M. Amorim da Costa
(Universidade de Coimbra)

¹ *Ciência, Pós-Ciência, Meta-Ciência - Tradição, Inovação e Renovação*, Raquel Gonçalves, Lisboa, Discórdia Editores Lda., Col. Omnia, 1991.

² Notas acerca de la recensión de libros especializados in *Ensayos de Historia de la Ciencia*, George Sarton, México, Ed. Hispano Americana, 1968, pp. 304-318.

Quiminformática (vols. 1 e 2)

Considerando que, segundo o autor, este livro¹ se destina, essencialmente, à disciplina de Química e Informática da Licenciatura em Ensino da Física e da Química, parece-me que se trata de uma obra complementar e de uma boa fonte de referências para alunos e professores.

Discordo, no entanto, do título: "QUIMINFORMÁTICA". Por duas razões:

1 - Parece-me que o computador é mais um instrumento imprescindível para o químico, tanto a nível experimental como teórico, mas não vai implicar novas concepções da Química como Ciência. Implica, sim, maiores (e espectaculares) possibilidades de se explorarem os conceitos e as aplicações químicas (aquisição e tratamento de dados, química quântica, simulação, quimiometria, grafismo, etc., etc.) sendo, hoje, "as experiências computacionais tradicionais e, por vezes mesmo, a única alternativa viável.

Não existe, na minha opinião, qualquer Informática (ou Ciência de Com-



putadores) particular da Química, como o título, porventura, poderá deixar transparecer, mas sim uma *área interdisciplinar muito vasta* que domina os métodos computacionais aplicados à Química. E, essa área, já foi acordada, a nível da

Federação das Sociedades de Química Europeias (FECS) designar-se por Química Computacional (Computational Chemistry).

2 - Não me parece que o conteúdo dos livros corresponda, na sua grande parte, à área da Química,

como o título, porventura, também poderá deixar transparecer. Aparte as referências específicas a alguns programas, instituições e fontes com interesse imediato para a Química, a maioria das referências e resumos são de aplicação completamente geral.

Por outro lado, parece-me que teria sido interessante a ilustração, com "outputs" numéricos e gráficos, de alguns dos programas referentes à Química. Torná-los-ia, certamente, mais claros nos seus objectivos e, consequentemente, mais aliciantes.

A despeito do que ficou dito acima, considero que a presente obra está escrita numa forma clara e correcta, que cobre uma lacuna na bibliografia portuguesa e, repito, que constitua uma boa fonte de referências para alunos e professores.

Parabéns ao autor.

Fernando M. S. Silva Fernandes
(Faculdade de Ciências de Lisboa)

¹ *Quiminformática*, J. Féria Seita, Almedina, 1991.

Livros Oferecidos

● *Elementos de Química*, de Vicente Coelho de Seabra (edição fac-similada da edição de 1788), Universidade de Coimbra, 1985. Oferta do Departamento de Química da Universidade de Coimbra.

● Monografias de Química, dirigidas por Kurt

Jacobsohn: *Constante Dieléctrica*, por Pereira Forjaz (1960); *Fundamentos de Cromatografia*, por Fernando Barreira (1960); *Electroforese*, por Maria Inez Soares (1961); *Aspectos Fundamentais de Volumetria de Oxi-Redução*, por Maria Alice Conceição (1966). Ofertas do Prof.

Mário Nuno Berberan Santos.

● *Quiminformática*, de José Féria Seita, Vols. I e II, Almedina, 1991. Ofertas do Autor.

● *Controlo de Processos: Tecnologia de*

Instrumentação, de C. D. Johnson, Fundação C. Gulbenkian, 1990. Oferta da tradutora, Eng. Maria Eugénia Fronteira e Silva.

● *Controlo de Qualidade dos Vinhos*, de António S. Curvelo Garcia, Instituto da Vinha e do Vinho, 1988. Oferta do Autor.

INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO



A força dos 80 anos !