

# QUÍMICA

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Água para consumo humano

Ericção Científica  
O método dos vapores metálicos



## BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



Na capa:

Pormenor de uma fonte  
do parque de Sceaux  
(França)**Propriedade de:**

Sociedade Portuguesa de Química  
ISSN 0870-1180  
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72  
Depósito Legal n.º 51 420/91  
Publicação Trimestral  
N.º 67 - Outubro-Dezembro 1997

**Redacção e Administração**

Avenida da República, 37 - 4.º 1050 LISBOA  
Telefone: (01) 793 46 37 - Telefax: (01) 795 23 49  
<http://spq.org>

**Director**

Mário Nuno Berberan e Santos

**Directores-Adjuntos**

Miguel Castanho, Benilde J. V. Saramago, Pedro C. Simões

**Direcção Gráfica**

Luís Moreira (TVM Designers)

**Secretária de Redacção**

Cristina Campos

**Comissão Editorial**

Rita Delgado (IST),  
Luís Rocha San Miguel (RAR, S.A.)  
Maria Gabriela Cepeda Ribeiro (UM),  
José A. Martinho Simões (FCUL)

**Colaboradores**

António Amorim da Costa (UC), João Paulo Leal (INETI)  
Manuel E. Minas da Piedade (IST)

**Publicidade**

DIRECÇÃO:  
Miguel Castanho

**Tratamento de Texto e Paginação**

Ana Cristina Moreira

**Execução Gráfica**

FACSIMILE, Offset e Publicidade, Lda.  
Rua Alexandre Sá Pinto, 177 - Tel. 364 99 95  
1300 LISBOA

Tiragem: 2400 exemplares

Preço avulso: 2500\$00

Assinatura anual-quatro números:

9000\$00 (Continente, Açores, Madeira e Macau)  
10000\$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 de «Química». São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas.

A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração são publicadas anualmente no número de Janeiro.

Publicação subsidiada pela  
Fundação para a Ciência e Tecnologia

2 notícias

4 notícias SPQ

9 notícias IUPAC

11 opinião

artigos

15 Água para Consumo Humano  
- Perspectivas Gerais sobre  
as suas Características  
e o seu Tratamento

LUÍS FILIPE DA COSTA CABEDO E SIMAS

21 A Microextração em fase sólida  
como técnica de preparação  
de amostras para cromatografia

ANA LUÍSA SIMPLÍCIO, LUÍS VILAS BOAS

25 ensino

As Novas Tecnologias de Informação  
no Ensino da Química: Proposta  
de uma aplicação de *software*  
hipermedia para o estudo  
da "Constituição da Matéria"  
no 8º ano de escolaridade

MARIA DA CONCEIÇÃO CLAVEL,  
MARIA DA CONCEIÇÃO DUARTE

31 antologia

32 técnicas experimentais

O Método dos Vapores Metálicos

JOÃO LUÍS A. FERREIRA DA SILVA

39 publicações / correspondência

42 novos produtos

## A Química na Europa: Diagnóstico das Forças e das Fraquezas

Os programas da UE para as áreas científicas são da responsabilidade da Comissão Europeia, que é auxiliada pelos organismos dependentes dos governos nacionais encarregues do financiamento e gestão das políticas científicas (que reunidos formam a organização EUROHORC) e pela ESTA (*European Science and Technology Assembly*). Para melhor poder actuar, a ESTA e a EUROHORC realizaram um diagnóstico da ciência nos países europeus, tendo-se cingido aos países da UE e Estados Associados. O relatório, tornado público recentemente, não inclui as áreas que dão «um ênfase específico à aplicação da ciência, nomeadamente, engenharia e tecnologias.» A metodologia consistiu em dividir a ciência em nove painéis temáticos (1 - Humanidades, 2 - Estudos económicos e sociais, 3 - Química, 4 - Matemática, 5 - Física, 6 - Bioquímica, biologia molecular e biologia celular, 7 - Biologia do organismo, 8 - Ciência do ambiente, e 9 - Geologia) e distribuir a coordenação dos trabalhos, dentro de cada tema, aos organismos nacionais, que nomearam um coordenador. Os coordenadores convidaram pequenas equipas de peritos, de diferentes nacionalidades e diferentes especialidades dentro de cada tema. O coordenador para a Química foi o Prof. J. L. García Fierro (*Consejo Superior de Investigaciones Científicas*, Espanha) e o seu grupo de trabalho dividiu a Química em sete áreas: 1 - Síntese, 2 - Catálise, 3 - Estrutura e Dinâmica, 4 - Química Supra e Macromolecular, 5 - Química nas interfaces, 6 - Química do Ambiente, e 7 - Química sob condições não clássicas. Como ferramentas de trabalho, foram utilizados dados estatísticos do *Chemical Abstracts* (distribuição geográfica da quantidade de artigos científicos publicados), relatórios internos de várias instituições europeias e consultas directas a alguns peritos, individualmente. Os dados estatísticos mostram que nos anos 1983, 1988 e 1993, a contribuição da UE para o global da produção científica em Química foi mantido, enquanto a do Japão cresceu e a da América do Norte cresceu ainda mais.

### A Química na Europa e no Mundo

Segundo o relatório, a indústria química é “um dos poucos ramos da produção onde a Europa continua a ter um papel primário no mundo”. A isto não será estranho o facto de a Europa ter uma “assinalável concentração de cientistas extraordinários”, que se têm destacado em domínios como, por exemplo, a aplicação à Química do NMR e outras técnicas físicas, síntese orgânica e organometálica, e catálise de polimerização. No global, a “Química é uma das áreas mais fortes da investigação académica e industrial europeia”. O seu nível “é comparável ao dos EUA”. No entanto, existem variações significativas entre as diferentes áreas estudadas.

**Síntese** - Os EUA contribuem mais para a inovação em síntese orgânica por causa da sua ênfase na actividade biológica de moléculas orgânicas. A Europa segue na frente em materiais para catálise heterogénea. Apesar da Europa ter alguns grupos de primeira linha em Química Bioinorgânica, o campo é dominado pelos EUA.

**Catálise** - O Japão foi o país que mais conseguiu em resultados industriais de catálise, particularmente em Química fina e intermediários. Contudo, a Europa continua forte em catálise para refinação e petroquímicos. A catálise em espaços confinados (por exemplo, zeólitos) tem sido muito impulsionada pela Europa mas na Química dos *clusters*, os EUA ultrapassaram-na.

**Estrutura e Dinâmica** - A Química Biológica está em bom estado de desenvolvimento na Europa, graças, sobretudo, a grandes instalações de alto nível, como, por exemplo, em NMR e cristalografia de raios X. Na Química Computacional, os EUA lideram mas existem na Europa grupos de vanguarda.

**Supra e Macromoléculas** - Os EUA têm uma ligeira vantagem em macromoléculas “naturais”, mas a grande força do campo vem da Europa. A Química de Polímeros tem uma distribuição por todo o mundo, mas a Europa tem a vantagem de localizar a sua investigação em centros de Química, em vez de Engenharia Química, como nos EUA.

**Interfaces** - A Electroquímica básica está mais desenvolvida na Europa do que a aplicada, que é sobretudo desenvolvida nos EUA e Japão. O painel recomendou que a Electroquímica básica europeia se concentre em áreas como os sensores, onde existe um potencial enorme para novas aplicações.

**Ambiente** - O Japão tem feito o melhor trabalho no desenvolvimento de instrumentação para análise ambiental. A Europa e os EUA disputam a liderança em Química Atmosférica, mas estes dispõem da vantagem de grande equipamento, como aeronaves para investigação. A investigação em poluição atmosférica é menos sofisticada na Europa, que lidera ao nível da Química Marinha.

**Não-clássica** - A microgravidade, as microondas, os ultrasons, etc. têm sido pouco estudados na Europa. No entanto, este continente tem sido mais forte em Química de altas pressões e temperaturas. A vantagem dos EUA nos lasers dá-lhe a vantagem em estudos detalhados de estados excitados. A presença europeia é julgada insuficiente em áreas mais recentes da fotoquímica.

### Algumas conclusões gerais

Os químicos académicos europeus continuam relutantes em trabalhar em equipas interdisciplinares ou com a indústria. Além disso, deverá haver uma mudança maciça de atitude nas universidades e institutos de investigação para remediar o problema de cientistas mais velhos restringirem as expectativas dos colegas mais novos, resistindo à reforma obrigatória.

Quanto ao relatório global, incluindo todas as ciências indicadas anteriormente, os autores destacam a necessidade de interdisciplinaridade e transferência efectiva de ciência para áreas de aplicação. No entanto, advertem: “Este respeito pelas aplicações deve, contudo, não ser considerado detractor da ênfase na ciência básica, como o sangue vital do empreendimento da investigação”.

### A Química na Europa

A Europa tem uma investigação particularmente forte nas seguintes áreas da Química:

- Síntese
- Catálise
- Estrutura, dinâmica, teoria e modelação

O nível de actividade em algumas áreas específicas é menor na Europa do que nos EUA e Japão, como por exemplo:

- Química de síntese dirigida para efeitos especiais e catálise assimétrica
- Química em espaços confinados (e. g. zeólitos)
- Desenvolvimento instrumental
- Química de alta resolução (temporal e espacial)
- Técnicas analíticas e Química de sensores
- Conversão e armazenamento de energia solar

Questões de maior preocupação:

- Manutenção do acesso a instrumentação de grande escala
- Baixa interdisciplinaridade das redes de investigação
- Pouca interacção entre as academias e as indústrias
- Fragmentação dos grupos académicos
- Dificuldades dos jovens químicos em desenvolverem os seus próprios projectos de investigação.

M.C.

## International Conference on Structure and Functionality of Food Products



Mragowo, Poland, May 18-20th, 1998  
(FECS No 229)

This conference is aimed at food scientists and technologists from universities, research centres and industry. The food areas covered include fruits and vegetables, cereals, milk and dairy products, meat, poultry and fish, emulsions, foams, spreads, dressings and biopolymer gels.

### The programme will focus on:

- the relationship between structure and functional properties
- the influence of processing conditions on structure
- the application of physico-chemical techniques to structural analysis
- future trends in analysis and measurement (with special emphasis on microscopy and image analysis).

### Amongst the plenary presentations will be:

**Microstructure and plant food quality** - *Prof. Dr. Felix Escher*, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland.

**Microstructural changes in plant materials during processing** - *Prof. Dr. Jozef Fornal*, Division of Food Science, IAR&FR, PAS, Olsztyn, Poland.

**The structure of dairy foods** - *Prof. Dr. Wolfgang Buchheim*, Federal Dairy Research Centre, Institute of Pro-

cess Engineering, Kiel, Germany.

**Muscle structure and meat quality** - *Dr. Richard Taylor*, SRV,INRA de Theix, St.Genes Champanelle, France.

**Observations on fat spreads, emulsifiers and liquid crystals** - *Dr. Isaac Heertje*, Unilever Research Laboratory, Vlaardingen, The Netherlands.

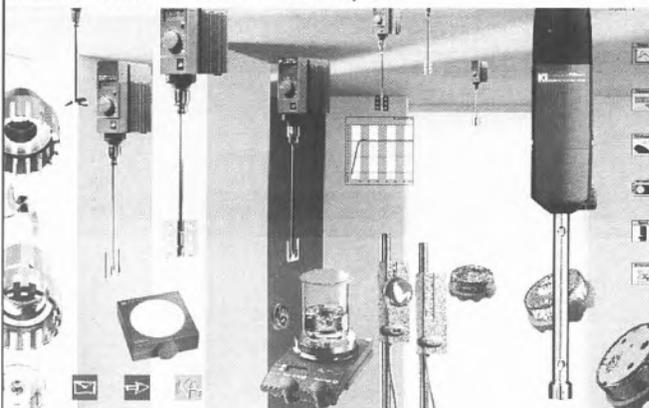
**Structure-functional relationships of food gels - theory and practise** - *Prof. Dr. Anne-Marie Hermansson*, SIK-The Swedish Institute for Food Research, Goteborg, Sweden.

**New imaging techniques and future developments** - *Dr. Han Blonk*, Unilever Research Laboratory, Vlaardingen, The Netherlands.

### Further details can be obtained from:

The conference office, Division of Food Science, Institute of Animal Reproduction and Food Research, Polish Academy of Sciences, Tuwima 10, PO Box 55, 10-718 Olsztyn, Poland, fax:(48) 89 523 78 24, e-mail: office@food.irzbz.pan.olsztyn.pl, fornal@food.irzbz.pan.olsztyn.pl, http://www.irzbz.pan.olsztyn.pl/microstructure/

## IKA®-CATALOG 96/97



Mais de 77 anos de experiência fizeram do IKA

o líder no fabrico de equipamentos de laboratório para a Indústria, Medicina e Investigação.

O Catálogo Geral com mais de 350 produtos e de fácil consulta oferece a escolha de produtos de alta qualidade tais como:

- Placas de Aquecimento;
- Agitadores Magnéticos;
- Agitadores Orbitais e de Vaivem;
  - Agitadores Vórtex;
  - Misturadores diversos;
- Homogenizadores (Turrax);
- Evaporadores Rotativos;
- Desintegradores de Ultrasons;
  - Viscosímetros;
  - Calorímetros;
- Equipamento para Laboratório Piloto.

Salientamos a nova gama de Agitadores de elevada qualidade técnica com design agradável e alto nível de ergonomia.

Representante:

 **LaboControle**

LABOCONTROLE  
EQUIPAMENTOS CIENTÍFICOS  
E DE LABORATÓRIO, LDA.  
Largo Prof. Fernando Fonseca, 5-B  
2795 LINDA-A-VELHA  
TEL. 419 79 45 - 415 14 29 - 414 31 48  
FAX 415 14 30

## Federation of European Chemical Societies Division of Food Chemistry

Authenticity and Adulteration of Food - the Analytical Approach (FECS N° 220)



The latest event organised by the FECS, Division of Food Chemistry together with the Swiss Society of Food and Environmental Chemistry took place in Interlaken, September 24-26, 1997. 314 participants from 36 different countries attended the meeting held at the Congress Centre of Interlaken, amidst the famous peaks of the Swiss Alps. The well organised catering and the nice lecture theatre together with the large congress Hall, where the exhibition of analytical equipment and the poster sessions took place, guaranteed a stimulating atmosphere for interesting discussions. The congress was opened by Welcome addresses by Dr. Urs Klemm, Head of the Food Science Division of the Federal Office of Public Health, by Dr. Jean-Luc Luisier, President of the Swiss Society of Food and Environmental Chemistry and by Dr. Reto Battaglia, Chairman of FECS Division of Food Chemistry and Head of the Organising Committee.

The scientific programme was divided into 8 sessions, each consisting of 1 main and 3 short lectures breaks followed by corresponding poster sessions during the long coffee or lunch breaks. For the posters there was an additional session with miscellaneous subjects. Each participant received the very comprehensive proceedings(\*) consisting of 3 volumes and a total of about 800 pages already upon registration. So the 32 lectures and 129 posters were very well documented. The following main topics were presented at the conference: Legal Aspects and the Role of Food Analysis; Authenticity of Meat, Adulteration of Meat Products; Adulteration of Milk and Dairy Products; Plant Products; Adulteration of Spices, Flavours and Aroma; Fruit Juice Adulteration; Carbohydrates and Adulteration; SNIF NMR and Authenticity; Chemotaxonomy and Authenticity. A prize (free registration for Euro Food Chem X, to be held from 22nd to 24th

September, 1999, in Budapest, Hungary) was awarded by the Scientific Committee for the three best poster presentations. The prizes were awarded to the following presentations: "Detection of Genetically Modified Food" (E. Koppel, E. Studer, J. Lüthy, P. Hubner, Switzerland); "Determination of Honey Authenticity and its Botanical Origin by Micellar Electrokinetic Chromatography (MEKC) and HPLC" (C. Corradini, G. Canali, A. Cavazza, E. Cogliandro, I. Nicoletti, Italy); "Authenticity of *Boronia* and *Osmanthus* Absolutes and Raspberry Flavours by Chiral GC/MS Analysis of Alpha and Beta Ionones" (N. Bouter, P. de Valois, F. P. Scaman, The Netherlands).

The conference provided ample opportunities for the interchange of scientific information on specific topics of interest to participants. Considerable attention was also paid to the exhibition of analytical equipment. During the whole Conference,

all participants profited from exceptionally nice weather, which cannot be taken for granted in this region, and had the possibility to attend either of the following two small tours: to Schynige Platte, a mountain 1967 m above sea level with an overwhelming panorama view especially of the famous Alpine peaks Eiger, Monch and Jungfrau, or to the Open Air Museum Ballenberg, a park-like museum complete with houses, farmhouses and rural crafts from past cultural eras. Most of the participants also enjoyed the exquisite conference dinner in the comfortable dining room of the Congress Centre. Surely all the participants took only the best of impressions from this conference back home to their lab or office.

Dr. O. Zoller (Berne)

(\*) Copies of the Proceedings are available and may be ordered for CHF 50.-+ shipping directly from Dr. J.-L. Luisier, Bibliothèque Ecole d'Ingénieurs du Valais, Route du Rawyl 47, CH-1950 Sion, Switzerland; or E-MAIL: jluc.luisier@eiv.vsnnet.ch

## XI Encontro Galego-Portugués de Química

Mantendo a tradição de alternância luso-galega destes eventos, foi na cidade costeira do Ferrol, um dos centros centro urbanísticos mais antigos da Galiza (actualmente com cerca 85 000 habitantes) que aconteceu a 11ª edição do Encontro Luso-Galego de Química, entre 26 e 28 de Novembro de 1997. O presente encontro foi realizado sob a orientação conjunta do *Colexio Oficial de Químicos da Galicia*, da *Asociación Nacional de Químicos ANQUE de Galicia* e da Delegação do Porto da Sociedade Portuguesa de Química. A organização local ficou a cargo da Escola Politécnica Superior da Universidade da Coruña, Campus de Ferrol. Assistiui à realização do evento um Comité de Honra presidido pelo Exmo. Sr. D. Manuel Fraga Iribarne, Presidente da Junta da Galiza, e composto por várias individualidades da região.

O número de participantes cifrou-se em 239, maioritariamente espanhóis, tendo a participação portuguesa atingido cerca de

30 %. Foram apresentadas 6 sessões plenárias, 90 comunicações orais e 66 em painel, num total de 162 trabalhos distribuídos por 10 áreas distintas da química: Química orgânica; Química inorgânica; Química-física; Bioquímica e biotecnologia; Catálise, colóides e superfícies; Química dos materiais; Química analítica; Química e ambiente; Química agro-alimentar; e Engenharia química.

A sessão de inauguração oficial do Encontro abriu com uma intervenção do representante do *Colexio Oficial de Químicos da Galicia / Asociación Nacional de Químicos ANQUE de Galicia*, D. José Varela Cardama, seguindo-se-lhe o representante da Delegação do Porto da Sociedade Portuguesa de Química, Prof. José Luís Figueiredo. Foi depois a vez do director da Escola Politécnica Superior de Universidade da Coruña, D. Enrique Casanova Rivas proferir o discurso de acolhimento, no que foi seguido pelo Vice-Reitor para as Relações Institucionais e Pós-

Graduação, D. Jorge Teijeiro, que manifestou o seu profundo agrado pela organização ter levado esta realização ao Campus de Ferrol e sobretudo elogiou a conjugação de esforços das Associações envolvidas como um bom prenúncio para o desenvolvimento da Euro-Região constituída pelo Norte de Portugal e Galiza. Presidiu à sessão o Presidente da Câmara do Ferrol, D. Juan Blanco Rouco, que encerrou com um discurso alusivo ao desenvolvimento da área Ferrolana e a sua relação com a Armada, bem como a importância do actual Campus Universitário nesse contexto.

O programa social contemplou uma recepção na Câmara Municipal, onde após a sessão de boas vindas por parte do Presidente da Câmara, teve lugar uma visita guiada ao edifício e um cocktail. O banquete do encontro foi realizado no Casino Ferrolano, e incluiu a actuação dum grupo vocal local que interpretou alguns temas tradicionais da região.

Ficou estabelecido que o próximo encontro terá lugar em Novembro de 1998, na Exponor, em Leça da Palmeira, Matosinhos. Decorrerá paralelamente à Quimitec, e Ambiente/Eneren, beneficiando todos os participantes do encontro de livre acesso a estas feiras. O comité directivo será composto por José Luís Costa Lima, Baltazar Romão de Castro e Joaquim Luís Faria, em representação da Delegação do Porto da SPQ e por José Varela Cardama, Juan Vieites Baptista de Sousa e Andrés Valiñas Rivas em representação do *Colexio Oficial de Químicos da Galicia / Asociación Nacional de Químicos ANQUE de Galicia*. A organização local estará a cargo da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. A primeira circular será distribuída aos sócios da SPQ durante o mês de Fevereiro e incluirá informação sobre o programa e datas mais importantes, bem como a ficha de inscrição definitiva.

JL Faria

## XVI Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

Universidade do Minho, Braga, 22-25 de Setembro de 1998.

O Departamento de Química da Universidade do Minho está já a organizar o XVI Encontro Nacional. Tendo por objectivo criar as condições para uma participação tão grande quanto possível e a necessidade cada vez mais premente de se integrar a Ciência em domínios que eram até recentemente só ocupados pela Cultura tradicional, foi decidido organizar este XVI Encontro sob um figurino que permita tratar diversos tópicos da Química em moldes tais que sejam associados aspectos científicos com aspectos culturais

com eles relacionados. Será assim um encontro temático, sendo a Cor o objectivo abrangente de todo o programa científico em que os professores dos Ensinos Básicos e Secundário serão especialmente lembrados. Temas como os corantes, a fotografia a cores, o fotocromismo, a terapia fotodinâmica, as espectroscopias, a visão cromática e os pigmentos naturais são alguns exemplos já assegurados no programa em preparação. Aceitaram contribuir com palestras plenárias alguns Químicos nacionais e outros estrangeiros,

além de que está já constituída uma extensa lista de nomes de Químicos portugueses que aceitaram apresentar comunicações sobre temas como aqueles listados acima. Além das palestras e comunicações com o formato tradicional, embora dirigidas para um público menos especializado do que era costume, serão aceites comunicações científicas em painel das quais a Comissão Científica seleccionará algumas para apresentação oral. Será também oferecido um programa adicional de pequenos cursos e workshops em

complemento do restante programa. Não será esquecido um programa social apropriadamente colorido e assim adaptado ao tema deste Encontro nacional, incluindo o tradicional jantar de confraternização. No próximo número do Boletim será incluída mais informação e, tendo em conta as inevitáveis limitações de espaço e que se espera uma grande adesão, nele será incluída também uma ficha de pré-inscrição.

*Hernâni Maia*

## Prémio de Prestígio atribuído à SPQ

Teve lugar no dia 10 de Maio de 1997, a comemoração de passagem do 10º Aniversário da Exponor - Feira Internacional do Porto. Tratou-se duma ocasião importante da vida empresarial e associativa, em que se pretendeu prestar algum reconhecimento a todos os que de algum modo contribuíram para fixar a Exponor como um dos mais importantes Parques de Exposições do país. Em Maio de 1995, Sociedade Por-

tuguesa de Química (SPQ), através da sua Delegação do Porto, estabeleceu com a Associação Industrial Portuense (AIPortuense) um protocolo de cooperação com o objectivo de promover periodicamente a realização de exposições demonstrativas das capacidades e potencialidades da indústria química. Por entender a Exponor que esta contribuição foi determinante na afirmação da Associação dos Parques de Exposição do Norte,

decidiu referenciá-la com a entrega dum diploma de prestígio (*ver figura*), durante a cerimónia de celebração do Aniversário da Exponor, e simultaneamente do 148º Aniversário da Associação Industrial Portuense. A cerimónia teve lugar nas magníficas instalações do Europarque, em Santa Maria da Feira e incluiu uma intervenção do Presidente da AIPortuense, Ludgero Marques, seguida da apresentação de lançamento do

livro "A Associação Industrial Portuense - Para a História do Associativismo Empresarial", entrega dos diplomas correspondentes aos Prémios de Prestígio e por fim uma intervenção do então Ministro da Economia, Augusto Mateus. Seguiu-se o jantar de aniversário e um serão musical no Grande Auditório do Europarque.

*JL Faria*



Diploma de Prestígio entregue à SPQ, assinado pelo presidente da Exponor, Henry Tillo e pelo presidente da AIPortuense, Eng.º Ludgero Marques.



## GLUPORTwo - II Congresso Internacional do Grupo de Glúcidos da Sociedade Portuguesa de Química

Porto 21-25 Setembro 1997

A cidade do Porto acolheu recentemente o II Congresso Internacional do Grupo de Glúcidos da Sociedade Portuguesa de Química, de 21 a 25 de Setembro de 1997.

O encontro teve lugar no Hotel Meridien, na zona ocidental da cidade, e estiveram presentes 120 delegados da Europa, Estados Unidos, Canadá e Japão. Entre os participantes encontravam-se os maiores especialistas mundiais na área dos hidratos de carbono, tendo sido apresentados trabalhos de elevado interesse dentro deste tema. É também de referir a excelente qualidade de trabalhos apresentados sob a forma de poster, tendo sido atribuído um prémio de "melhor poster" a uma equipa nacional.

Salientamos ainda o facto de os organizadores deste evento estarem ligados à Indústria do Açúcar, RAR-Refinarias de Açúcar Reunidas, Porto, contando com a colaboração da Universidade na organização científica do encontro.

A Indústria da refinação do açúcar representada pela ARAP- Associação dos Refinadores de Açúcar Portugueses, teve ainda um papel de destaque facultando Bolsas de Participação para estudantes o que permitiu que 8 instituições universitárias do país estivessem presentes com 27 alunos.

Neste encontro foram apresentados trabalhos relacionados com hidratos de carbono tanto das Universidades como da Indústria, o que permitiu o intercâmbio de ideias e conhecimentos de ambos os sectores. Esta aproximação permite à Universidade orientar a sua investigação nas áreas de interesse para a indústria. Também para a Indústria é fundamental estar atenta aos novos desenvolvimentos científicos ocorridos na sua área. Este intercâmbio verificou-se neste encontro tanto ao nível dos palestrantes como dos congressistas em geral.

A apresentação científica dos trabalhos esteve dividida em quatro pastras plenárias, dezasseis palestras convidadas e catorze comunicações orais.



Sessão de Abertura

Das palestras plenárias salientamos os trabalhos apresentados pelos seguintes oradores:

Prof. Pierre Sinay da Ecole Normale Supérieure de Paris, França, sobre os "Recent Advances in Synthesis of Carbohydrate Mimics".

A Dra Margaret Clarke do Sugar Processing Research Institute, Inc., Nova Orleães, E.U.A., apresentando um trabalho sobre "Carbohydrates as renewable resources, present and future".

O Prof. Gary Gray da Universidade de Minnesota, E.U.A., apresentando o trabalho "The reductive cleavage method for polysaccharide structural analysis".

A quarta palestra plenária foi apresentada pelo Prof. Johannes Vliegthart do Centro Bijvoet, da Universidade de Utrecht, Holanda. Esta palestra versava os "Studies on the structure of glycoproteins".

No Congresso foram abordados diversos temas relacionados com os hidratos de carbono como, sua síntese, análise e aplicações nomeadamente no campo farmacêutico e agroquímico.

Vários foram os autores que apresentaram comunicações sobre síntese e/ou desenvolvi-

mento de hidratos de carbono com potenciais aplicações em diversas áreas de interesse. O Dr. Hermann K Hombrecher, Universidade de Lubeck, Alemanha apresentou o trabalho intitulado "Carbohydrate substituted porphyrins. Synthesis, characterization and lipoprotein binding properties"; o Dr. G.J.F. Chittenden da Universidade de Nijmegen, Holanda apresentou "Synthesis and reactions of some glycosidic spiroacetal derivatives of D-fructopyranose. Novel quasi- di and trisaccharides"; o Dr. Peter Konradsson da Universidade de Estocolmo, Suécia com "Synthesis of glycosyl phosphatidylinositol anchors and phosphatidyl-inositol-(3,4,5)triphosphate"; o Dr. Paul H. Gross da Universidade do Pacífico, E.U.A. com "New synthetic pathways to C-glycosides"; a Dra. Inge Lundt da Universidade Técnica da Dinamarca com "Stereoselective synthesis of optically active, highly functionalized carbocycles from aldonolactones". Na área da aplicação farmacêutica destacaram-se os trabalhos do Prof. Jacques Defaye da Universidade de Grenoble, França, sobre "Cyclodextrins, supramolecular devices for drug transport and target-

ing", do Prof. John F. Kennedy da Universidade de Birmingham, Reino Unido, sobre "Carbohydrate polymers as wound management aids"; do Prof. Per Garregg da Universidade de Estocolmo, Suécia com "Synthesis of oligosaccharides of biomedical relevance"; do Dr. Beat Ernst sobre "Sialyl Lewis<sup>x</sup> and synthetic analogues thereof as new anti-inflammatory drugs"; do Prof. Zbigniew J. Witczak, da Universidade de Connecticut, E.U.A., com o tema " Stereoselective synthesis of C-, S- and N-glycosides of therapeutic potential from levoglucosenone"; e do Dr. Yogesh Sanghvi, da ISIS Pharmaceuticals, USA, sobre "Methylene (methylimino) linkage as an ideal backbone for antisense constructs". O uso de hidratos de carbono como cristais líquidos foi o assunto da apresentação do Prof. George Jeffrey da Universidade de Pittsburg, E.U.A.. A Prof. Amélia Pilar Rauter da Universidade de Lisboa, apresentou o trabalho sobre a Química dos hidratos de carbono orientada para a aplicação agroquímica, visando também potenciais aplicações para os carboidratos; o Prof. H. van Bekkum, da Universidade de Delft, Holanda, apre-

sentou o trabalho intitulado "Oxidised and carboxy-alkylated carbohydrate and some potential applications".

Focando outros aspectos da química dos glúcidos foram apresentados os trabalhos do Dr. Paul Godé, Universidade de Amiens, França com "X-O-n-alkylitols. Substrate structure and alkyl chain position influences on their liquid crystalline properties"; da Dra. Renée van Schijndel de ATO-DLO Wageningen, Holanda com "Biopolymers used in microspheres and microcapsules", do Dr. Shigehiro Shirano da Universidade de Tottori, Japão com "Fiber preparation of N-acylchitosan and its composite with cellulose by spinning their sodium xanthate solutions"; do Dr. Mario Pagliaro do CNR, Itália com "New autocatalytic oxidations of primary alcohols in cellulose in phosphoric acid"; do Prof. Francesco Nicotra com o tema "Synthesis of potential inhibitors of carbohydrate processing enzymes". O Prof. Gerard Descotes, da CNRS/Béghin-Say, França, apresentou as últimas novidades na área da química da sacarose.

Diversos métodos de análise foram apresentados por diferentes autores: Prof. Giorgio Mantovani, da Universidade de Ferrara, Itália, com "Utilization of planar chromatography in the sugar industry", Eng. Luís Bento da RAR-Refinarias de Açúcar Reunidas, Porto, com "Study of HMW compounds in sugar using gel permeation chromatography with an evaporative light scattering detector"; Dr. Manuel A. Coimbra, da Universidade de Aveiro, com "Quantification of arabinose in pectic polysaccharides by FT-IR spectroscopy" e Dra Isabel Ferreira, Universida-

de do Porto, com "Determination of sugars, and some other compounds in infant formulae, follow-up milks and human milk by HPLC-W/RI".

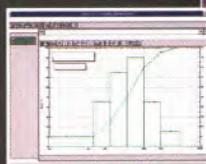
A Cristalização de açúcar foi abordada pelo Prof. Mohamed Mathlouthi da Universidade de Reims, França, na comunicação intitulada "Approaching sugar crystallization at a molecular level: role of water structure and interactions", e pelo Doutor Sebastião Feyo de Azevedo da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Portugal com o trabalho "Modelling sucrose crystallization. A simulator for operators training".

Contámos ainda com um trabalho do Prof. Manuel Mota da Universidade do Minho, sobre o uso de hexoglucanase CBH I para síntese de oligossacarídeos; um estudo do Prof. R J. Stoodley, do UMIST, Reino Unido, com o tema "Stereocommunication through glycosidic linkages", um trabalho da Dra. Júlia Costa, ITQB/IBET, Oeiras, com "Construction of recombinant BHK cell lines expressing wild-type and mutants of human 1,3/4-fucosyltransferase". O Dr. Artur Cavaco-Paulo da Universidade do Minho, deu uma perspetiva geral do uso de celulasas na indústria têxtil.

Estiveram também presentes no encontro trinta e duas comunicações sobre a forma de poster. Os "posters" foram expostos durante todo o congresso, numa sala contígua às sessões, tendo sido dedicadas duas horas para a sua apresentação e discussão estando os respectivos autores presentes. Procedeu-se também à avaliação do melhor Poster, cabendo o prémio de "melhor poster" à comunicação "Rheological

## REPRODUTIBILIDADE EXACTA

O agitador de peneiros  
**RETSCH mod. AS 200:**  
três modelos à medida do  
seu orçamento & aplicação



### CARACTERÍSTICAS PRINCIPAIS:

- sistema de fixação, rápido
- baixo ruído, sem manutenção
- compatível com procedimentos de acordo com ISO 9000

**Retsch**  
Internet: <http://www.retsch.de>

EN Equipamentos • Labnorma  
Tel.: +351 (0) 29 48 69 05  
Fax: +351 (0) 14 44 81 00

Characterisation, under Steady Shear, of a Polysaccharide (LaCan) Obtained via Fermentation of Whey-related Media" da autoria de M. E. Pintado, A. E.

Pintado, J. A. da Silva e F. X. Malcata da Escola Superior de Biotecnologia do Porto.

Na parte social houve uma recepção aos delegados numa Cave de Vinho do Porto em Gaia, um Sarau Musical no Palácio da Bolsa, um Jantar de Encerramento com actuação de um grupo de cantares e danças regionais da zona do Porto e uma visita ao vale do Douro tendo-se visitado uma quinta da região da Régua. Para os acompanhantes do Congresso foi organizado um passeio à cidade do Porto.

Durante o Congresso foi anunciado que a realização do GLUPOR III será na cidade de Aveiro sob a coordenação do Prof. Manuel Coimbra. Caberá assim à organização deste encontro a uma instituição universitária neste caso ao Departamento de Química da Universidade de Aveiro. Aos organizadores desejamos o maior sucesso.



Sala de Conferências - Hotel Meridien, Porto

### 3º Encontro Nacional de Química-Física

Realizou-se na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa (Monte de Caparica), de 20 a 22 de Novembro último, o 3º Encontro Biental da Divisão de Química-Física da SPQ, sendo Presidente da Divisão de Química-Física o Professor Manuel Nunes da Ponte, e Presidente da Comissão Organizadora o Professor Fernando Pina (ambos da FCT-UNL). Contou com cerca de 150 participantes, e cerca de uma centena de comunicações

em cartaz, em que se incluíam, em secção separada, projectos de Química-Física de alunos de licenciatura, ideia feliz que merece ser continuada. O programa foi constituído por três lições plenárias (*Arquitecturas*, por Jorge Calado, do IST; *Machines and Logic Gates at the Molecular Level*, por Vincenzo Balzani, da Universidade de Bolonha; e *A Química de Adsorvidos em Superfícies Metálicas: Tratamentos Teóricos*, por José Ferreira Gomes, da Universidade do Porto), e por dez conferências tópicas (*Calorimetria de Combustão de Compostos Aromáticos Halogenados*, por M. Luísa Ferrão (UP); *Precipitação de Sólidos com Fluidos Supercríticos*, por Edmundo Gomes Azevedo (IST); *Structure of Sol-Gel Systems Followed by Fluorescent Probes*, por J.M.G. Martinho (IST); *Structural Elucidation of Substituted Carboxylic Acids by Low Temperature Matrix-Isolation and Solid State Spectroscopy*, por Rui Fausto (UC); *Non-diffusion-controlled Excimer Forma-*

*tion with Indan and Acenaphthene. Kinetics and Thermodynamics from Picosecond Time-Resolved Fluorescence*, por António Maçanita (IST e ITQB); *Energética de Compostos de Metais Alcalinos e Alcalino-Terrosos*, por João Paulo Leal (ITN); *Electroquímica e Protecção Ambiental*, por Irene Montenegro (UM); *A Energia Superficial de um Sólido*, por Benilde Sarago (IST); *Estudo Teórico da Estrutura Electrónica e Reactividade Fotoquímica de Compostos Os<sub>3</sub>(CO)<sub>10</sub>(N-N)*, por M. José Calhorda (UL); *Termoquímica de Halogenetos de Alquila em Álcoois*, por Raquel Gonçalves (UL)). O programa social incluiu um espectáculo com o coro da UNL e a Tuna Masculina da FCT-UNL, bem como um jantar nos arredores da Universidade. O Encontro, bem organizado e com um programa equilibrado de conferências interessantes, permitiu ainda aos participantes conhecerem as modernas estruturas de ensino e investigação da Faculdade de Ciências e Tec-



V. Balzani proferindo a sua conferência.

nologia da UNL. Na sessão final do Encontro procedeu-se à eleição do novo Presidente da Divisão de Química-Física, tendo sido escolhida unânime o Professor Hugh Burrows, da Universidade de Coimbra.



O Secretário-Geral da SPQ, Gaspar Martinho, e o Presidente da Divisão de Química-Física, Nunes da Ponte, durante a Sessão de Abertura do Encontro.

## Congressos, Conferências e Reuniões Científicas

### IUPAC

15th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics  
Julho 26- Agosto 1, 1998  
Faculdade de Ciências  
Universidade do Porto  
Rua do Campo Alegre, 687  
P- 4150 Porto, Portugal

9th IUPAC International Congress on Pesticide Chemistry  
Londres, Inglaterra  
Agosto, 2-7, 1998  
Dr. John F. Gibson

9th IUPAC International Congress on Pesticide Chemistry  
The Royal Society of Chemistry  
Burlington House  
London W1V 0BN, UK  
Tel.: 44-171-437 8656  
Fax.: 44-171-734 1227

### SPQ

ESEAC'98 - 7th European Conference on ElectroAnalysis  
Coimbra, Portugal  
Maio, 24-28, 1998  
Prof. Dr. C. M. A. Brett / ESEAC'98  
Departamento de Química  
Universidade de Coimbra  
3049 Coimbra, Portugal  
Tel.: 039-35295

### Geral

IX Seminário Ibérico de Química Marinha  
Aveiro, Portugal  
Abril, 16-18, 1998  
Prof. Dr. Armando da Costa Duarte  
Departamento de Química  
Universidade de Aveiro  
Campus de Santiago  
3810 Aveiro, Portugal  
Tel.: 034-730723  
Fax.: 034-25143  
E-mail: aduarte@dq.ua.pt

III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics  
Mira, Portugal  
Maio, 4-7, 1998  
IBER98 - Secretariado  
a/c Cláudia Martins  
Química Teórica & Computacional  
Departamento de Química  
Universidade de Coimbra  
P - 3049 Coimbra Codex, Portugal  
Tel.: 039-852080  
Fax.: 03927703  
E-mail: iber98@cygnus.ci.uc.pt

6th FECS Conference on Chemistry in the Environment:  
*Atmospheric Chemistry and Air Pollution*  
Copenhaga, Dinamarca  
Agosto, 26-28, 1998  
Ole John Nielsen  
Atmospheric Chemistry Building  
313  
Plant Biology and Biogeochemistry Dept.  
Risø National Laboratory

DK-4000 Roskilde, Denmark  
Tel.: 45 46774201  
Fax.: 45 46774202  
E-mail:  
ole.john.nielsen@risoe.dk

International Conference on Microwave Chemistry  
Praga, República Checa  
Setembro, 6-11, 1998  
MWCH Conference  
Dr. Milan Hájek  
Institute of Chemical Process Fundamentals  
Acad. Sci. of the Czech Republic  
Rozvojová 135  
165 02 Prague 6 - Suchbát  
Czech Republic  
Tel.: 420-2-203 90 292  
Fax.: 420-2-209 20 661  
E-mail: MWCH@icpf.cas.cz

Conference on Quality and Quantity of Mediterranean Water Resources:  
*Water in the Mediterranean Area*  
Sardenha, Itália  
Outubro 11-18, 1998  
Mrs R. Sleiter

Società Chimica Italiana  
Viale Liegi 48/C  
00198 Roma, Itália  
Tel.: 06 8549691/8553968  
Fax.: 06 8548734  
E-mail: soc.chim.it@agora.stm.it

CHEMTEC PRAHA '98  
INCHEBA Praha, s.r.o.  
Ing. Katerina Huclová  
P. O. BOX 555  
111 21 Praha 1, Czech Republic  
Tel.: 420-2-24195237,  
24195429  
Fax.: 420-2-241952286,  
24195361

IBERSENSOR'98  
*I Congreso Iberoamericano de  
Sensores e Biosensores*  
Novembro, 9-13, 1998  
Havana, Cuba  
Dr. José Antonio Rodríguez  
Facultad de Física, Universidad  
de la Habana  
San Lázaro y L, CP 10400,

Vedado, C. de la Habana, Cuba  
Tel.: 537 704270/783471  
Fax.: 537 333758  
E-mail:  
ibersensor@ffuh.fmq.uh.edu.cu  
e jar@ffuh.fmq.uh.edu.cu

## Perspectivas e recomendações da IX Conferência Mundial sobre o Papel dos Materiais Avançados no Desenvolvimento (Chemrawn)

### Seven Findings:

1. For all materials there is a need to establish credible models to determine true life cycle cost/effects so that proper choices between materials and technologies can be made.
2. While advances are being made in the recycling of materials, much still needs to be done in the difficult area of recycling manufactured goods containing these materials.
3. The conservation of and the development of quality water supplies is a need that must be met to avoid future civil strife and meet the goals of sustainable development. Advanced materials can help meet this need.
4. In developing countries locally available materials may be significant upgraded with small amounts of materials or processing technology from outside the region.
5. There are a number of opportunities for improvement and use of traditional materials consistent with the goals of sustainable development.
6. Advanced materials have the potential to effect the extent to which various energy options contribute to sustainable development.
7. The over-riding importance of good catalysis research can effect the approach to truly sustainable production of many advanced materials.

### Six Recommendations:

1. All IUPAC adhering bodies should work through their local associations to make the case with national funding agencies of the need for basic research on advanced materials and understanding properties and opportunities in the context of sustainable development. (Five important areas were suggested)
2. We support the ready transfer of environmental technologies across industries, across nations, and across public/private sectors; we want to focus the switch from control and remediation technologies to avoidance and resource conservation.
3. We urge government and international organizations to recognize that proper support of Intellectual Property rights can help in the introduction of advanced materials and process technologies to further sustainable development.
4. We seek promotion of technical education with emphasis on sustainable development. (Will be included in a future CHEMRAWN conference). The public should be reminded of the significance of advanced materials and the role they play in society.
5. Experts should define (in writing) the needs and opportunities in advanced materials to build a better awareness in the public of the contributions of chemistry and advanced materials to our society and to sustainable development.
6. We urge that where awards are given, special recognition be given to advances in developing materials that contribute to sustainable development.



# Soft Ciências

SPF - Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
 3000 COIMBRA PORTUGAL  
 Telef: 039 - 410600 (ext. 524) Fax: 039 - 29158  
 email: softci@feor5.fis.uc.pt  
 Internet: [http://www.fis.uc.pt/~spf/soft\\_c/soft\\_c.html](http://www.fis.uc.pt/~spf/soft_c/soft_c.html)

### Ação Comum das:

- Sociedade Portuguesa de Física
  - Sociedade Portuguesa de Química
  - Sociedade Portuguesa de Matemática
- para produção de software educativo  
 APOIOS: **Ministério da Ciência e Tecnologia e  
 Ministério da Educação**

## PROGRAMAS DE COMPUTADOR PARA O ENSINO DAS CIÊNCIAS

### Omniciência 97

- **Soft Ciências**  
Software educacional para Química, Física e Matemática
- **Tabela Periódica Multimédia**  
Tudo sobre os elementos químicos
- **Read Ciências**  
Recursos para o Ensino, Aprendizagem e Investigação das Ciências
- **Nonius**  
Recursos para o ensino da Matemática
- **Catasoft F-97**  
Base de dados sobre software educacional em Física
- **Novidades Omniciência na Web**  
Necessita de ligação à Internet (<http://www.fis.uc.pt/OMNI/OMNI.html>)

**Soft Ciências**

Coordenação: Carlos Fiolhais  
e João Paiva

Apoio do Ministério da Ciência e Tecnologia

### CD-ROM Omniciência '97

- Inclui todos os programas da Acção Comum **Softciências**, o programa Tabela Periódica Multimédia, páginas READCiências e Nonius da Internet e base de dados sobre software para o ensino da Física.

**Alguns dos programas estão ainda disponíveis em disquete com o respectivo manual:**

#### 6. FQ-FOLHA DE CÁLCULO

Programas em "Excel"

#### 8. FRACTAIS

Um mundo de imagens matemáticas

#### 9. MILLIKAN

Meça a carga do electrão

#### 11. TABELA PERIÓDICA

Tudo sobre os elementos

#### 13. JOGO DAS COISAS

Jogos de fazer pensar (multidisciplinar)

#### 14. EUROCHEM

Elementos químicos na Europa

#### 15. ZERO 2.0

Concepção e correcção de testes

(multidisciplinar)

#### 16. TESTA FQ / 8-9

800 perguntas de Físico-Químicas (8º e 9º anos) para testes.

#### 17. ÂNGULOS

Trigonometria no computador

#### 18. RLC

Circuitos de corrente alternada

#### NOVIDADE:

#### 19. TESTA FQ 10 / 11

600 perguntas de Físico-Químicas (10º e 11º anos)

#### 20. TESTA Q 12

450 perguntas de Químicas (12º ano)

OS MANUAIS DESTES PROGRAMAS INCLUEM TESTES QUE PODEM SER POLICÓPIADOS.

Para solicitar o CD-ROM ou algum destes programas preencha o destacável e envie para:

Sociedade Portuguesa de Física, **Softciências**, Departamento de Física, Universidade de Coimbra, 3000 COIMBRA

**Próximos lançamentos:** OMNICIÊNCIA '98; TESTA F 12; LECHAT 2.0 (simulações em equilíbrio químico); KEPLER 2.0



COLOCAR UMA CRUZ NOS PROGRAMAS PRETENDIDOS

PEDIDO DE PROGRAMAS

NOME DO PROGRAMA	PREÇO	PREÇO *	NOME DO PROGRAMA	PREÇO	PREÇO *
<input type="checkbox"/> CD-ROM OMNICIÊNCIA	5000	4000	<input type="checkbox"/> 14. Eurochem	1500	1000
<input type="checkbox"/> 6. FQ -Folha de cálculo	1500	1000	<input type="checkbox"/> 15. Zero 2.0	1500	1000
<input type="checkbox"/> 8. Fractais	1500	1000	<input type="checkbox"/> 16. Testa FQ / 8-9 **	2000	1500
<input type="checkbox"/> 9. Milikan	1500	1000	<input type="checkbox"/> 17. Ângulos	1500	1000
<input type="checkbox"/> 11. Tabela Periódica	1500	1000	<input type="checkbox"/> 18. RLC	1500	1000
<input type="checkbox"/> 13. Jogo das coisas	1500	1000	<input type="checkbox"/> 19. Testa FQ / 10-11 **	2000	1500
			<input type="checkbox"/> 20. Testa Q 12	2000	1500

\* Sócios SPF, SPQ, SPM

\*\*Inclui testes que podem ser policopiados

Junto envio cheque / vale de correio / requisição nº \_\_\_\_\_, relativo ao pagamento de \_\_\_\_ programas e \_\_\_\_ CD-ROM, conforme o quadro.  
 Remeter para: SOFTCIÊNCIAS, SPF, Departamento de Física da Universidade de Coimbra, 3000 COIMBRA.

# Fricção Científica: será necessária uma alternativa à revisão inter-pares em avaliações científicas?

MIGUEL A. R. B. CASTANHO\*

O trabalho científico, desde a ideia original até à publicação do trabalho final e impacto subsequente, é frequentemente caricaturado pela seguinte sucessão de etapas:

- 1) Entusiasmo
- 2) Desilusão
- 3) Pânico
- 4) Procura do culpado
- 5) Castigo dos inocentes
- 6) Honra e glória para os não participantes

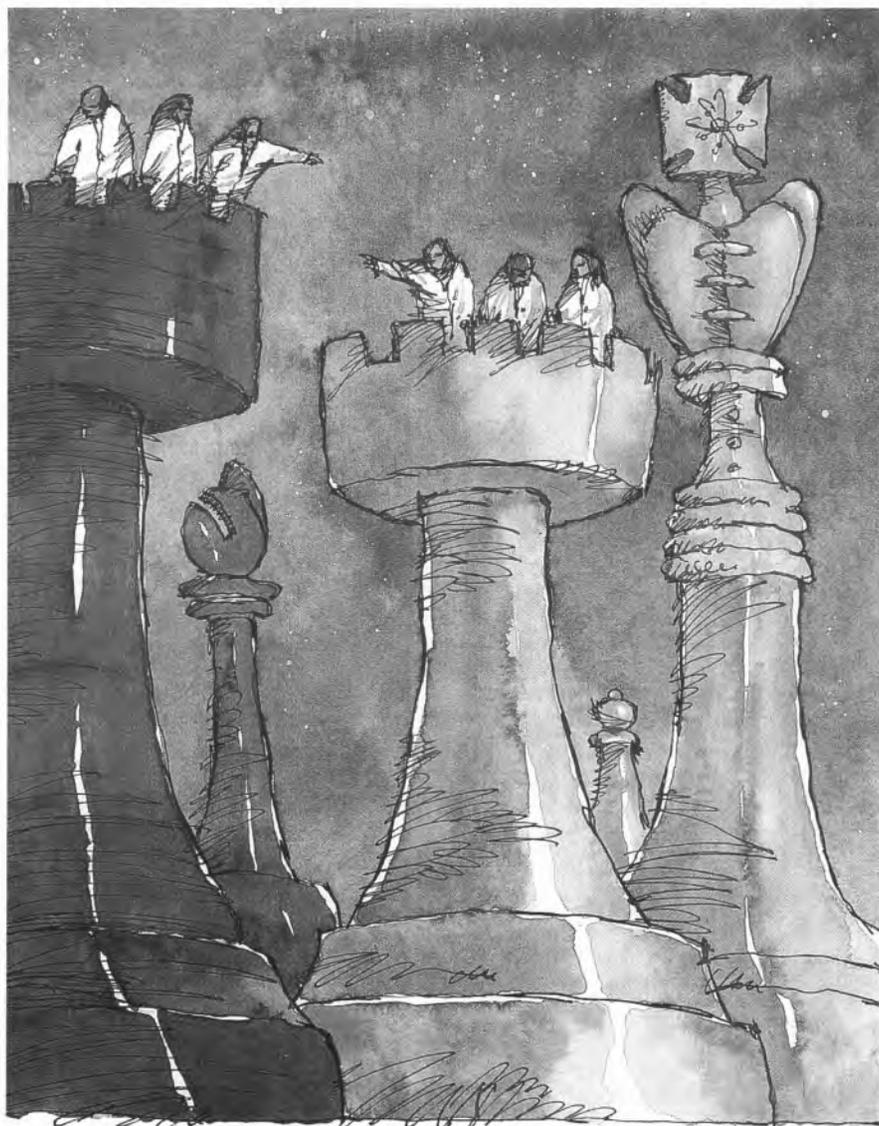
Para que a caricatura não se torne retrato e se atinja um nível pleno de verdade, honestidade e satisfação na actividade científica, há que manter o ponto 1) e abolir os restantes (excepto o 4º), se for caso disso). Impedir que a eventual honra e glória (que na quase totalidade das vezes é desprovida de qualquer reconhecimento público ou fausto material) vá parar a mãos e cabeças não participantes, tem solução relativamente fácil: abolir a co-autoria honorária de artigos científicos. As relações hierárquicas são distintas das colaborações científicas. Só deve constar como autor quem participou de facto no desenvolvimento do trabalho que se publica. É este o único critério que se pode seguir com honestidade. O uso de co-autoria como compensação de outras actividades, para contentar superiores hierárquicos ou em função da pressão destes, é condenável [1]. Outros problemas não são de solução tão simples: Como impedir que a mediocridade se generalize nas publicações científicas sem travar a inovação? O actual mecanismo de triagem existente nas revistas científicas de reconhecido valor, baseia-se na avaliação por peritos que emitem pareceres sobre determinado trabalho. Desse parecer pode resultar, ou não, a publicação, segundo decisão do Corpo Editorial da revista. Os peritos escolhidos como revisores permanecem anónimos para os autores<sup>1</sup>. O sistema tem a designação habitual de *Peer-review* (revisão inter-pares) e não é perfeito. As lacunas são facilmente apontadas:

1) Atrasa a publicação dos trabalhos, tornando o processo antecedente à publicação, por vezes, bastante fastidioso. O problema de atraso de publicação exerce tal pressão sobre os corpos editoriais das revistas, que a Sociedade Americana de Química decidiu colocar em edição electrónica todas as suas 26 publicações, imediatamente após o processo de revisão inter-pares, desde o último mês de Setembro [2]. Alguns defendem mesmo que os manuscritos sejam submetidos a diferentes revistas simultaneamente [3], mas tais medidas acarretam riscos (nomeadamente, a multiplica-

ção de versões do mesmo trabalho) e existem outros mecanismos, mais rápidos, de apresentação de resultados e conclusões (congressos, divulgação electrónica de resumos, etc.) que tornam as submissões simultâneas desnecessárias [4].

2) Aumenta os custos associados à publicação<sup>2</sup>.

3) É vulnerável a condutas contrárias à ética, como plágio, quebra de confidencialidade e boicotes por parte de grupos/investigadores concorrentes. O sistema de avaliação dos candidatos a bolsas de estudo ou de projectos científicos candidatos a financiamento, consiste também



numa revisão inter-pares, tal como se usa para julgar o mérito de um trabalho científico submetido a uma revista de prestígio para publicação. Duas investigadoras suecas realizaram um estudo sobre a atribuição de fundos para bolsas durante o ano de 1995 no seu país e concluíram que os candidatos beneficiam das ligações aos revisores [5]. No entanto, em países de maior dimensão este efeito de "interacção com o vizinho mais próximo" pode não ser tão forte [6,7].

4) O cepticismo e/ou ignorância dos revisores pode impedir a publicação de trabalhos que contenham visões mais inovadoras. Pelo menos oito artigos capazes de merecer o prémio Nobel para os seus autores foram rejeitados por revisores [8].

Mas é um facto que este sistema tem impedido uma avalanche de mediocridade grosseira na literatura científica. É fácil de imaginar o que aconteceria se não existisse qualquer tipo de crivo sobre a qualidade dos trabalhos a publicar: curas milagrosas, materiais fantásticos, extraterrestres, monstros em lagos ou fora deles, e tudo o mais em que se queira crer. A falta de credibilidade generalizar-se-ia. Passaríamos a ter Ficção Científica a disputar espaço à Ciência. Mais vale a actual fricção científica que a alternativa ficção científica. A questão é i) como melhorar o actual sistema? ou ii) qual o sistema que pode substituir o actual nas funções de crivo da qualidade dos trabalhos enviados às revistas para publicação? Este tema tem suscitado a atenção crescente da comunidade científica, incluindo a ligada à Química. Nos últimos três anos, vários artigos de opinião têm sido publicados. O assunto tem vindo a tomar uma actualidade tal que ultrapassou as barreiras herméticas do seio da comunidade científica; algo de muito raro para um assunto que não tem implicações directas com o quotidiano do cidadão comum. A revista *Ambassador*, no seu número de Setembro de 1997 dedicou um

artigo a este tema [9]. A *National Science Foundation* (EUA), pressionada por críticas constantes, nomeou uma comissão para estudar a simplificação do processo de avaliação de projectos candidatos a financiamento, sucedendo ao processo de revisão inter-pares. O anterior sistema foi substituído a 1 de Outubro deste ano, mas as alterações resumem-se à inclusão de parâmetros de relevância económica e social [10].

#### ALTERNATIVAS PROPOSTAS PARA SUCEDER AO SISTEMA DE REVISÃO INTER-PARES

Rustum Roy, um guru dos críticos ao sistema de revisão inter-pares e investigador na Pennsylvania State University, deu nas vistas por anunciar em conferência de imprensa, em 1992, os resultados da sua investigação sobre síntese de diamantes, antes destes serem aceites para publicação numa revista científica. Desprezou a "certificação" que os seus pares lhe poderiam dar [11]. Em 1995 criou uma revista para publicar rapidamente resultados novos, inesperados e inovadores, sem o sistema de revisão inter-pares. A revista, intitulada *Innovations in Materials Research*, examina os *curricula* dos autores, nomeadamente as suas publicações passadas [12]. Qualquer investigador com pelo menos 50 publicações ou patentes, pode publicar livremente nesta revista. Se os autores ainda não tiverem 50 artigos ou patentes, podem ser patrocinados por colegas nestas condições. Se isso não for possível, os autores têm que deixar a sua lista de publicações passadas ser avaliada. Ver neste sistema uma alternativa ao da revisão inter-pares é claramente um equívoco. Para possuir um *curriculum* com publicações é obrigatório ter passado inicialmente por uma fase de revisão inter-pares. Corolário: o sistema de revisão inter-pares tem que existir. Não há alternativa. Se não se chegar a 50 publicações, é necessário um "pa-

trócinio". se o sistema de revisões inter-pares é vulnerável ao compadrio, o de "patrocínio", vive dele. Em último recurso, a lista de publicações dos autores é avaliada pelo corpo editorial. Isto é, a revista tem o seu próprio sistema de revisão inter-pares, só que recaindo sobre uma matéria diferente. Mas talvez o mais assustador seja pensar que quem atingir 50 publicações (muito fácil no sistema proposto, com uma "mãozinha" de um colega que já as tenha...) pode publicar indiscriminadamente, sem controlo<sup>3</sup>. Apesar de todas estas críticas, em que não estou só [13], Rustum Roy tem defensores [14, 15].

Mais consistente é a proposta de Juan M. Campanario [8]. No sistema de publicação actual, os autores competem para obterem "espaço de publicação" em revistas prestigiadas, enquanto outras revistas, de menor prestígio, têm dificuldades em obter manuscritos e podem ter que aceitar trabalhos de menor qualidade para se manterem activas. Segundo aquele investigador da Universidade de Alcalá (Madrid), a solução seria a criação de uma "montra virtual", onde os autores colocariam os seus manuscritos. Os corpos editoriais das revistas poderiam então consultar periodicamente esta "montra" para localizar manuscritos potencialmente inovadores. Se mais que uma oferta for feita aos autores, estes escolherão em que revista publicar. As revistas recrutariam especialistas em cada campo com a função de "caça-talento" (neste caso, não pessoas mas manuscritos). A ideia é que com vários "caça-talento" à procura de trabalhos meritórios, a probabilidade de um manuscrito com ideias inovadoras não ortodoxas ser atrasado por um único revisor preconceituoso, seria quase nula. Em alguns casos, os autores prefeririam uma publicação mais rápida, em revistas menos prestigiadas. Este sistema, contudo, não contorna a revisão inter-pares clássica, apenas reverte os papéis da oferta e procura de manuscritos. Não se trata de uma alteração de princípio,

tão só de uma mudança na *praxis* da implementação do sistema de revisão inter-pares, com vantagens quanto ao tempo de publicação e sensibilidade a preconceitos individuais dos revisores. Na realidade, uma meditação mais atenta quanto a esta proposta, revela que ela não é diferente da submissão simultânea de um manuscrito a várias revistas, a que já aludi antes.

### NECESSITAMOS DE MUDAR?

Que o sistema actual pode ser permeável ao preconceito, ignorância e conservadorismo, ninguém duvida. No entanto, é inegável que a grande oferta de revistas onde publicar permite contornar estas desvantagens. Além disso, entre o fogo cerrado e as críticas, poucos apontam as virtudes do sistema. É experiência comum a muitos que bastantes revisores apresentam críticas construtivas e oferecem sugestões úteis que podem elevar a qualidade do manuscrito, revertendo o benefício em favor dos autores e leitores. Para isso, há que escolher bons revisores. Esta é uma missão dos editores das revistas, que deveriam assumir um papel de grande relevo e total responsabilidade. A questão que se coloca, no entanto, é: como garantir que a ignorância (muitas vezes disfarçada de arrogância e má-educação traduzidas em comentários insultuosos na apreciação dos manuscritos [16]) e má fé estejam ausentes? Obviamente, grande parte do problema seria resolvido pela auto-exclusão de cada um, se não se sente com competência para avaliar um determinado trabalho. Mas convém haver um mecanismo institucional; algo que não recaia tanto sobre a sempre falível natureza humana. Estamos condenados a encarar a submissão simultânea de manuscritos a várias revistas como única forma de minorar os defeitos do sistema de revisão inter-pares? Creio que não. Existe uma alternativa mais simples e menos arriscada.

### UM MAL DESNECESSÁRIO: A REVISÃO ANÓNIMA DE CONTRIBUIÇÕES CIENTÍFICAS

Em 4 de Julho de 1994, o Prof. Gregorio Weber<sup>4</sup>, enviou uma carta ao editor da revista *Nature* (que provavelmente nunca chegou a ser publicada), intitulada *An unnecessary evil: the anonymous refereeing of scientific contributions*. Nessa carta, é dito que «*I have seen example after example in which the report of the referee, if such is the appropriate designation, consists of a long diatribe with many adjectives and few nouns and verbs. The object of the exercise appears to be to make clear, without benefit or further proof, the superiority of the referee or the dismal inferiority of the author. Habit has apparently immunized editorial officers against the sight and sound of such horrors as indicated by the accompanying little note that, " ... in view of the unfavorable report of the referee we have regrettably to deny publication." I feel few doubts that if the same referee would have known that his statements were to become public record he would think twice before substituting real substantive argumentation by value judgments and pejorative adjectives. In my scientific life I have refereed hundreds of papers, and no doubt I made some erroneous statements, but I always took special care to limit my reports to what I considered scientific arguments. I have kept copies of most of those reports, and in no case I would have in the least objected that my name be communicated to the author of the criticized paper.*» Aqui está uma boa solução: abolir o anonimato do sistema de revisão inter-pares. Quais são os argumentos que podem justificar o anonimato se a aceitação ou rejeição de artigos (ou concessão ou não de bolsas e financiamentos) só pode basear-se em critérios de natureza científica? Da transparência do processo só podem resultar benefícios, vindos da responsabilização dos revisores. Linguagem ofensiva, má-fé e falta de objectividade e conteúdo científico seriam claramente diminuídos em textos não anónimos. Igualmente, um revisor sob protecção do anonimato é menos sensível a combater o seu

próprio desleixo e pode, consequentemente, demorar um tempo injustificadamente longo para efectuar a sua tarefa. Não necessitamos rejeitar o sistema de revisão inter-pares, basta melhorá-lo removendo o secretismo. A esta conclusão chegaram também Wenneras e Wold em resultado dos estudos atrás citados. A ideia que seria mais difícil recrutar revisores caso o anonimato fosse banido, é desmentida pela prática (ainda que verdadeira, poderíamos argumentar que restariam menos mas melhores revisores). Na Suécia, uma decisão de um tribunal obrigou a tornar públicos os resultados das avaliações dos revisores, desde 1995, mas não houve debandadas nem deserções em larga escala das comissões de avaliação. Esta questão deveria ser ponderada por todos os responsáveis pela avaliação do desempenho na actividade científica, quer se trate da publicação de manuscritos, atribuição de bolsas ou financiamento de projectos. Tal como escreveu ainda o Prof. G. Weber na carta há pouco referida, «*Secrecy and anonymity have been consistently driven off from many aspects of public life where they were once enshrined. Their disappearance has not been followed by any bad effects but, on the contrary, by renewed confidence in the institutions that have banished them. Science in general, and scientific publication in particular, have much to gain by abandoning the old "star chamber" methods in favor of the public transparency which is in the very nature of science*» Eu concordo! E o leitor?

\* Centro de Química Física Molecular  
(Instituto Superior Técnico, Lisboa)  
e Departamento de Química e Bioquímica  
(Faculdade de Ciências da UL, Lisboa)

### NOTAS

<sup>1</sup> Em alguns países e em determinadas áreas (como, por exemplo a de Direito, nos EUA), existe um anonimato recíproco: os revisores permanecem anónimos para os autores e vice-versa.

<sup>2</sup> Estes custos não estão relacionados com o pagamento aos revisores, uma vez que o trabalho de avaliação não é pago. Os custos implicados incluem portes de correio, apoio de secretariado e material gasto na reformulação de manuscritos, execução de experiências adicionais, etc.

<sup>3</sup> Faz-me lembrar uma análise descrita por J. Ziman em *Reliable Knowledge* (Cambridge UP, 1978): « A very typical case is the professional scientist of some standing who goes gently around the curve and begins to expound some incoherent irrational theory. (...) It is very difficult to prove that he is insane. When a bank manager goes dotty, and hands out five pound notes in the street, claiming to be the reincarnation of the late Mr. Paul Getty, there is not much doubt that he is unfit for his job; but a famous professor respected for his brilliant insights, long experienced in the byeways of his subject, can conjure up a fascinating scaffolding of special pleading and plausible conjecture to support his obsession. The only professional colleagues competent to diagnose his condition can be accused of prejudice or jealousy.» Este investigador publicaria indefinidamente na revista criada por Rustum Roy.

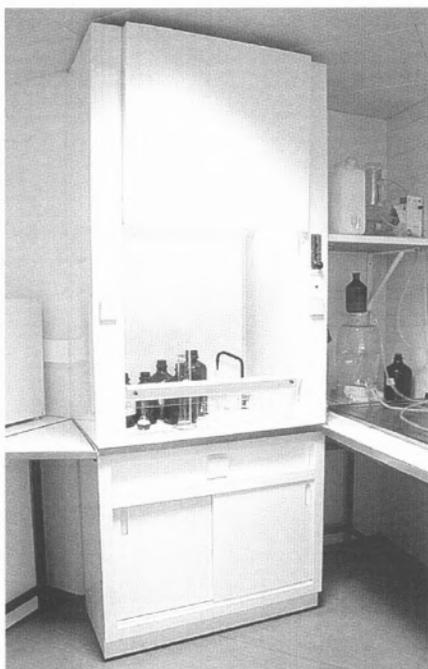
<sup>4</sup> Nota biográfica em *Química - Boletim Soc. Port. Química*, 66, (1997).

#### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Santos, M. N. B. (1988) A desonestidade em Ciência, *Boletim da Soc. Portuguesa de Química*, 31 (Série II), Março, 9.
2. Schulz, W. (1997) ACS moves to full on-line publishing, *Chem. & Eng. News*, 18 Agosto, 9.
3. Berezin, A. (1997) Journal submission, *Chem. & Eng. News*, 24 Março, 6.
4. Bauer, S. H. (1997) Establishing priority, *Chem. & Eng. News*, 4 Agosto, 6.
5. Wenneras, C. e Wold, A. (1997) Nepotism and sexism in peer-review, *Nature*, **387**, 341.
6. Roubi, M. (1997) Study suggests Swedish peer review biased, *Chem. & Eng. News*, Maio, 10.
7. Lepkowski, W. (1997) No gender bias in its grant awards, says NSF, *Chem. & Eng. News*, 8 Setembro, 10.
8. Campanario, J. M. (1997) The "journal scout", *The Scientist*, 11(10), 9.

9. Daviss, B. (1997) The referees of R&D, *Ambassador*, Setembro, 32-36
10. Lepkowski, W. (1997) Peer review adds social relevancy, *Chem. & Eng. News*, 7 Abril, 9.
11. Borman, S. (1992) Solid-state process produces synthetic diamond, *Chem. & Eng. News*, 26 Outubro, 5.
12. Dagani, R. (1995) New journal forgoes traditional peer review, *Chem. & Eng. News*, 22 Maio, 26-27.
13. e. g. Robinson, C. W. (1995) Scrapping peer review, *Chem. & Eng. News*, 17 Julho, 4.
14. Erhan, S. (1995) Scrapping peer review, *Chem. & Eng. News*, 17 Julho, 4.
15. Evans, M. (1996) Peer review, *Chem. & Eng. News*, 29 Janeiro, 4.
16. Davenport, D.A. (1996) Opprobrium: Occurrence, Preparation, Properties, and Uses, *The Chemical Intelligencer*, Abril, 45-50.

## MOBILIÁRIO ESPECÍFICO PARA LABORATÓRIOS



- Bancadas Murais
- Bancadas Centrais
- Bancadas de Lavagem
- Hottes
- Mesas para Balanças
- Carros para Transporte
- Armários de Parede
- Armários Ventilados para Reagentes

  
SOQUÍMICA

**Sociedade de Representações e Química, Lda.**

Rua Coronel Santos Pedroso, 15 • 1500 LISBOA • Tel.: 716 51 60 • Fax: 716 51 69  
Sede Social: Av. da Liberdade, 220-2º • 129 LISBOA CODEX  
Rua 5 de Outubro, 269 • 4100 PORTO • Tels.: 609 30 69 • Fax: 600 08 34  
Email: soquimica@mail.telepac.pt; Internet: www.soquimica.pt

# Água para Consumo Humano - Perspectivas Gerais sobre as suas Características e o seu Tratamento

LUÍS FILIPE DA COSTA CABEDO E SIMAS\*

## 1. CURIOSIDADES HISTÓRICAS

Desde os tempos mais remotos que a utilização da água para o seu fim mais nobre, o consumo humano, tem sido feita obedecendo a determinados cuidados. Um texto médico apócrifo datado de 2000 A.C. refere que antes de se consumir água, esta deveria ser fervida, ou aquecida ao sol, ou introduzindo-lhe um ferro em brasa ou então filtrá-la num leito de areia. Estes dados mostram que desde muito cedo o Homem apercebeu-se que a água poderia provocar doenças. Alexandre, o Magno, durante as suas conquistas aconselhava as suas tropas a beber apenas água fervida.

Foi durante o Império Romano, que o abastecimento de água sofreu um grande desenvolvimento tecnológico. Os Romanos construíram captações de água (barragens, poços), aquedutos para efectuar o seu transporte e condutas em pressão feitas de chumbo ou terracota comprimida. Durante o percurso de transporte de água eram feitas bacias de retenção para a remoção de sólidos (decantação). A elevação da água foi outro aspecto que os Romanos desenvolveram utilizando parafusos de Arquimedes, noras, rodas e bombas rudimentares. A utilização da água pelos Romanos atingiu mesmo os aspectos lúdicos (banhos, jogos e fontes para decoração). Já no século II, os caudais afluentes à cidade de Roma atingiam valores de 13 m<sup>3</sup>/s, para uma população de cerca de um milhão de habitantes. A queda do Império Romano e as invasões bárbaras levaram a um retrocesso nos desenvolvimentos tecnológicos atingidos no tratamento e abastecimento de água para consumo humano. Só durante o Renascimento, e mais tarde com a Revolução Industrial e o conseqüente afluxo das populações rurais às cidades, surgiu a necessidade de se desenvolverem sistemas de abastecimento de água e drenagem de águas residuais.

Em meados do século XIX, o médico John Snow conseguiu relacionar um surto de cólera em Londres com a contaminação da água. Ao

desligar a bomba manual de um poço verificou uma diminuição do número de casos de cólera, descobrindo posteriormente que o problema estaria num soldado recentemente chegado da Índia e alojado numa pensão cujos esgotos corriam perto do referido poço.

Foi no início do século XX, que se começaram a desenvolver sistemas de desinfecção da água em Inglaterra e nos Estados Unidos da América, introduzindo-se a cloração nos sistemas de abastecimento. Até aos anos setenta, o tratamento efectuado na água tinha como principais objectivos obter uma água isenta de microorganismos patogénicos, sem turvação e quimicamente estável. Para tal utilizava-se o chamado tratamento convencional que consistia numa pré-cloração, coagulação, sedimentação, filtração e cloração final. O desenvolvimento da indústria com a crescente rejeição de efluentes nas linhas de água, e do conhecimento científico com a descoberta de subprodutos dos processos de desinfecção levou a que se procurassem novos processos de desinfecção da água (ozonização, dióxido de cloro ou radiação ultravioleta). No final dos anos oitenta com o crescente aparecimento de compostos cada vez mais complexos com efeitos nefastos para a saúde pública surgiram as filtrações com carvão activado e as ultrafiltrações como forma de assegurar que a população receberia uma água de qualidade.

## 2. PRINCIPAIS CARACTERÍSTICAS DAS ÁGUAS

As águas podem ser classificadas em:

- águas atmosféricas
- águas superficiais doces
- águas subterrâneas
- águas marinhas

### a) águas atmosféricas

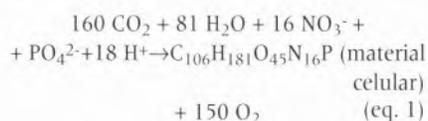
As águas atmosféricas são caracterizadas por serem saturadas em

oxigénio e azoto e não conterem sais minerais dissolvidos. Podem em regiões industrializadas serem um veículo de transporte de substâncias nocivas (ex: chuvas ácidas).

### b) águas superficiais

As águas superficiais doces são os rios, lagos e albufeiras. As águas dos rios (zona montante) são águas com elevada turvação, pequena contaminação bacteriológica, baixa temperatura e baixos valores de cor. A zona jusante das águas dos rios, devido a estarem geralmente junto de regiões com elevada densidade populacional e industrial, apresenta contaminações significativas aos níveis bacteriológico, orgânico e inorgânico. A cor é também elevada dada a presença de algas e elevadas quantidades de matéria orgânica dissolvida. As águas dos lagos e albufeiras são uma boa fonte de abastecimento de água potável (ex: Barragem de Castelo de Bode). Os lagos e albufeiras funcionam como grandes tanques de sedimentação, o que justifica os baixos valores de cor e turvação das suas águas. Estas águas podem sofrer ao longo do tempo uma perda de qualidade, já que o armazenamento de grandes quantidades de água favorece a decomposição da matéria orgânica e a dissolução de metais (ferro, manganês, cálcio e magnésio). As características destas águas variam com a profundidade (tabela 1). Ao longo do ano as variações são muito lentas, excepção feita a dois curtos períodos no ano, nos quais se dá um fenómeno denominado *turnover* (mistura rápida das águas), que provoca um aumento brusco da turvação da água, explicado pela estratificação de temperaturas no lago ou albufeira. Durante o Verão as camadas superficiais das águas de um lago ou albufeira aquecem mais rapidamente que as do fundo. No início do Outono, o arrefecimento é mais rápido superficialmente provocando um aumento da densidade da água, que resulta na deslocação das camadas superficiais para o fundo. Durante o inverno ve-

rifica-se uma diminuição da temperatura de toda a massa de água. Na primavera repete-se o processo, com o aquecimento mais rápido das camadas superficiais. A camada de água mais fria denominada **hipolímnio** é caracterizada pelo seu baixo teor em oxigénio favorecendo-se por isso o surgimento de organismos anaeróbios. A zona de mudança brusca de temperatura denomina-se **metalímnio**, enquanto que a camada de água mais quente é o **epilímnio**. A concentração de oxigénio dissolvido é alterada nesta camada devido aos processos de respiração e fotossíntese das algas. Em determinadas condições (luz solar, temperatura e nutrientes - azoto e fósforo) pode dar-se um crescimento exagerado de algas e outras plantas de acordo com a seguinte equação:



Quando temos a presença de elevados teores de material celular, diz-se que o lago está eutrofizado. Nestas circunstâncias, a água apresenta um aumento dos teores dos parâmetros organolépticos (turvação, cor, cheiro e sabor). Existem vários graus de eutrofização podendo os lagos serem classificados em **oligotrófico**, **mesotrófico** e **eutrófico**, quando a concentração de células de algas por mililitro é de, 1000-2000, 2000-5000 e 5000-20000, respectivamente.

Tabela 1 - Variação dos teores de determinados parâmetros, num lago, a diferentes profundidades

Parâmetro	Profundidade (m)			
	1	8	12	20
Temperatura (°C)	25	20	10	10
Saturação em O <sub>2</sub> (%)	150	100	25	0
pH	8.5	8.2	8.0	7.5
Azoto (mg N/l)	0.05	0.10	0.8	3
Fósforo (mg P/l)	0.02	0.05	0.20	2.0
H <sub>2</sub> S (mg/l)	0	0	0	10
Fe			elevado	elevado
Mn			elevado	elevado

### c) águas subterrâneas

A filtração natural que as águas subterrâneas sofrem no solo contribui para a baixa turvação e a praticamente inexistente contaminação bacteriana. As águas subterrâneas apresentam também uma temperatura constante, um baixo índice de cor e um caudal constante. O contacto que estas águas sofrem com as formações rochosas pode contribuir para uma dureza elevada (presença de iões Ca<sup>2+</sup> e Mg<sup>2+</sup>, principalmente). A baixa percentagem de saturação em oxigénio dissolvido contribui para que estas águas dissolvam metais, essencialmente ferro e manganês.

### d) águas marinhas

As águas marinhas só em condições muito excepcionais serão usadas para a produção de água potável, dados os elevados custos financeiros necessários para a dessalinização da água. Estas águas são caracterizadas essencialmente por terem elevadas concentrações de sais minerais, que podem variar entre 7000 mg/l (Mar Báltico) a 43000 mg/l (Mar Vermelho e Golfo Pérsico).

## 3. TRATAMENTO DE ÁGUAS PARA CONSUMO HUMANO

### 3.1. Operações de tratamento de águas destinadas a consumo humano

São vários os procedimentos que se podem executar para ade-

quar uma água de determinadas características que permitam a sua utilização para consumo humano. Será feita uma descrição desses procedimentos que depois se podem utilizar em conjunto ou isolados, consoante as características da água a tratar.

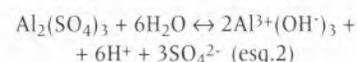
#### 3.1.1. Microtamisação

A microtamisação consiste em fazer passar a água num tambor constituído por uma rede metálica com dimensões que variam entre 0.02 a 0.06 mm, que está parcialmente imerso em água. Este tambor gira com uma velocidade que varia entre os 0.05 e 0.5 m/s. Utiliza-se a microtamisação essencialmente para remoção de algas em águas superficiais destinadas ao consumo humano.

#### 3.1.2. Coagulação

A coagulação é um processo químico utilizado para remover colóides (partículas com dimensões inferiores a 10 µm). Estes colóides podem ser óxidos metálicos, proteínas de grandes dimensões e microorganismos. A maior parte das partículas coloidais têm carga negativa, o que as impede de se agregarem e poderem ser decantadas. Assim a introdução de um coagulante permite a sua destabilização fazendo com que se agreguem formando flocos de grandes dimensões. Os principais coagulantes utilizados são os sais de ferro e alumínio. Geralmente como adjuvantes deste processo são utilizados os chamados polielectrólitos, que devido às suas longas cadeias moleculares actuam com um mecanismo de formação de pontes inter-partículas.

O processo químico de coagulação que ocorre com os sais metálicos de alumínio é o descrito pela equação 2.



A adição à água dos sais de alumínio liberta os iões Al<sup>3+</sup> que neu-

tralizam as partículas coloidais (negativas) favorecendo assim a sua coagulação. No entanto, são os hidróxidos de alumínio que resultam da ligação entre os íons  $\text{Al}^{3+}$  e  $\text{OH}^-$ , que sendo insolúveis formam precipitados, constituindo por isso coagulantes mais fortes.

### 3.1.3. Floculação

Depois da destabilização provocada pelos mecanismos de coagulação, as partículas aglomeram-se formando flocos. Os mecanismos utilizados para promover o contacto entre as partículas são dois: movimento *browniano* (floculação pericínética ou natural) e a utilização de forças exteriores para promover esse contacto (floculação ortocinética). Quando as partículas a flocular têm tamanhos superiores a  $1\ \mu\text{m}$  a floculação pericínética é muito lenta pelo que se recorre à floculação ortocinética que consiste em provocar turbulência na água utilizando, por exemplo, pás mecânicas.

### 3.1.4. Sedimentação

Geralmente a filtração, rápida ou lenta, é um processo que se utiliza com muita frequência no tratamento de água. No entanto, só funciona com eficiência se a concentração de sólidos suspensos totais for inferior a  $5 \times 10^{-3}\ \text{Kg/m}^3$ .

Recorre-se por isso à sedimentação coadjuvada pela coagulação-floculação para diminuir a concentração de sólidos suspensos totais. A sedimentação consiste apenas em deixar depositar as partículas com uma massa específica superior à água. Este processo é tanto mais rápido, quanto maior for o tamanho das partículas a depositar. A água sobrenadante obtida pode então seguir no percurso de tratamento para um filtro, que afinará a sua qualidade em termos de sólidos suspensos.

### 3.1.5. Filtração

A filtração é um processo físico que permite a remoção de sólidos

suspensos e a redução do número de bactérias e outros organismos, fazendo passar a água através de um meio poroso. Os leitos destes filtros são geralmente de areia podendo utilizar-se em simultâneo a antracite. Os filtros podem ser rápidos ou lentos, consoante a sua velocidade de filtração podendo ser utilizados isoladamente ou em conjunto, consoante o objectivo pretendido. No entanto, os filtros lentos estão a cair em desuso, uma vez que são precisas áreas muito grandes para os implantar. Contudo, estes filtros têm a vantagem de efectuar um tratamento biológico removendo bactérias e outros microorganismos, o que não acontece nos filtros rápidos. Esta remoção acontece porque dada a baixa velocidade de filtração há formação de um biofilme sobre o leito do filtro. Este biofilme é constituído por uma mistura de algas e bactérias nitrificantes (camada autotrófica), que permitem a remoção do azoto, fósforo e libertação de oxigénio, e por bactérias e outros microorganismos (camada heterotrófica) que removem a matéria orgânica existente na água.

O mecanismo de filtração pode ser descrito como uma combinação de alguns fenómenos, estando descritos a seguir os mais importantes:

- separação mecânica, que consiste na remoção das partículas com dimensões superiores aos poros dos filtros
- sedimentação, que consiste na deposição das partículas com tamanho inferior aos poros na superfície dos grãos de areia por um processo semelhante ao ocorrido na sedimentação
- adsorção do material em suspensão
- actividade química, em que impurezas são decompostas noutras insolúveis, e consequentemente removidas
- actividade biológica, que consiste na utilização de matéria orgânica existente na água por microorganismos

### 3.1.6. Amaciamento

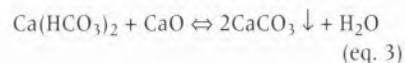
As águas podem classificar-se em:

- águas muito duras (dureza superior a  $300\ \text{mg/l}$  de  $\text{CaCO}_3$ )
- águas duras (dureza entre  $150\text{-}300\ \text{mg/l}$  de  $\text{CaCO}_3$ )
- águas moderadamente duras (dureza entre  $75\text{-}150\ \text{mg/l}$  de  $\text{CaCO}_3$ )
- águas macias ou brandas (dureza inferior a  $75\ \text{mg/l}$  de  $\text{CaCO}_3$ )

Quando uma água tem uma dureza elevada (superior a  $150\ \text{mg/l}$ ), pode-se recorrer ao amaciamento ou abrandamento da água, que consiste na remoção total ou parcial dos íons  $\text{Ca}^{2+}$  e  $\text{Mg}^{2+}$ . A necessidade de efectuar esta redução da dureza prende-se com alguns inconvenientes das águas duras que são o aumento do consumo de sabão nas lavagens e a precipitação dos íons  $\text{Ca}^{2+}$  sob a forma de carbonato de cálcio ( $\text{CaCO}_3$ ), nas condutas de distribuição da água.

O amaciamento da água pode ser efectuado mediante a utilização de dois processos:

1. precipitação química, que consiste na adição de um composto (cal, carbonato de sódio, soda cáustica) à água, que promova a formação de precipitados de carbonato de cálcio e de hidróxido de magnésio.

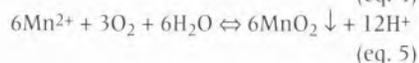
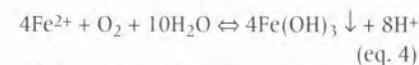


2. permuta iónica, que consiste em fazer passar a água por uma resina permutadora de íons que retira os íons  $\text{Ca}^{2+}$  e  $\text{Mg}^{2+}$ , trocando-os por íons  $\text{Na}^+$ . A resina depois é regenerada fazendo passar contracorrente uma solução concentrada de  $\text{NaCl}$ .

### 3.1.7. Remoção de ferro e manganês

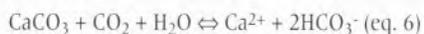
A presença destes metais na água deve ser evitada não por razões de saúde pública, pois o ferro é um elemento essencial para o meta-

bolismo humano, mas sim por razões estéticas. Além de conferirem um gosto desagradável à água, mancham os tecidos durante as lavagens e provocam a formação de precipitados nas condutas de distribuição da água, favorecendo o desenvolvimento de ferrobactérias (massa gelatinosa causadora de um aumento de turvação da água). O mecanismo de remoção consiste em transformar formas solúveis destes metais ( $\text{Fe}^{2+}$  e  $\text{Mn}^{2+}$ ) em formas insolúveis ( $\text{Fe}^{3+}$  e  $\text{Mn}^{4+}$ ). Tal consegue-se promovendo-se uma oxidação por arejamento, por exemplo, seguido de uma decantação e filtração para a remoção dos precipitados formados segundo as equações químicas seguintes:

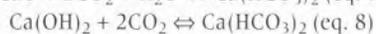
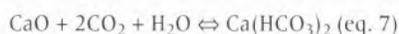


### 3.1.8. Estabilização

Muitas destas operações de tratamento, como é visível nas equações apresentadas podem alterar o pH da água, sendo necessário por vezes ajustá-lo para que a água não seja nem agressiva nem incrustrante. A correcção da agressividade pode ser efectuada fazendo a água passar por um leito de brita calcária, eliminando o  $\text{CO}_2$  em excesso transformando-o em hidrogenocarbonatos solúveis ( $\text{HCO}_3^-$ )



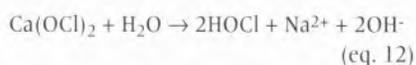
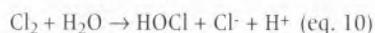
ou então, por adição de cal viva ou apagada ou carbonato de sódio, por exemplo.



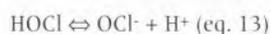
Quando uma água é incrustrante consegue-se a diminuição de pH mediante a adição de ácido carbónico (recarbonatação), ou então acidificando com os ácidos sulfúrico ou clorídrico (acidificação).

### 3.1.9. Desinfecção

A desinfecção será porventura a operação comum a todos os esquemas de tratamento de água, independentemente das suas características e origem. A necessidade de eliminar os possíveis microorganismos patogénicos que a água possa transportar levou a que várias tecnologias de desinfecção fossem desenvolvidas. Actualmente, as tecnologias de desinfecção de águas mais usadas são as que utilizam o cloro (nas suas diversas formas), ozono e radiação UV. O cloro é o agente desinfectante mais utilizado em todo o Mundo (cerca de 80% das desinfecções). As grandes desvantagens deste agente são a formação de compostos organoclorados (trihalometanos, que são compostos potencialmente cancerígenos), a formação de clorofenóis que provocam odores desagradáveis e o facto de não ser suficientemente forte para eliminar, por exemplo, os vírus. O cloro pode ser utilizado nas formas gasosas ( $\text{Cl}_2$ ), hipocloritos de sódio e cálcio ( $\text{NaOCl}$  e  $\text{Ca}(\text{OCl})_2$ ) e dióxido de cloro ( $\text{ClO}_2$ ). As reacções das diversas formas de cloro com a água estão esquematizadas nas equações seguintes:



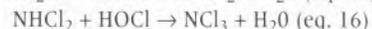
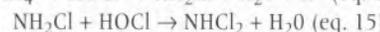
O ácido hipocloroso ( $\text{HOCl}$ ) decompõe-se segundo a seguinte equação:



Tanto o ácido hipocloroso ( $\text{HOCl}$ ) como o ião hipoclorito ( $\text{OCl}^-$ ) actuam como desinfectantes, sendo no entanto, o primeiro cerca de 80 vezes mais eficiente do que o segundo. Esta dissociação do ácido hipocloroso é dependente do pH da

água. Assim, quanto mais alcalina é uma água menor é a capacidade de desinfecção já que o grau de dissociação da equação 7 é muito elevado.

O cloro permite a manutenção de um residual que garante a eliminação de eventuais contaminações que possam surgir no percurso de distribuição da água. A presença da amónia ( $\text{NH}_4^+$ ) na água promove a formação de cloraminas ao reagir com o  $\text{HOCl}$ :



Assim, temos a formação respectivamente, de monoclорaminas ( $\text{NH}_2\text{Cl}$ ), dicloraminas ( $\text{NHCl}_2$ ) e tricloraminas ( $\text{NCl}_3$ ). As monoclорaminas e dicloroaminas também têm poder desinfectante, embora mais fraco que o ácido hipocloroso e o ião hipoclorito. No entanto, o seu poder desinfectante é muito duradouro pelo que nalgumas estações de tratamento é adicionada juntamente com o cloro, a amónia.

O ozono tem propriedades oxidantes muito fortes e uma vez que não provoca nem odores nem sabores tem sido utilizado em substituição do cloro, embora seja uma técnica de desinfecção mais cara. Outras vantagens do ozono são a possibilidade de se combinar com o ferro e manganês formando-se hidróxidos insolúveis, mais fáceis de remover; a capacidade de neutralizar compostos tóxicos como cianetos e fenóis e a sua elevada reactividade com compostos orgânicos. O ozono em combinação com carvão activado permite reduzir cor, cheiro, sabor e microorganismos utilizando doses de 1 mg/l, com tempo de contacto de 10 minutos. Além de ser uma tecnologia mais dispendiosa, o ozono não deixa um residual, pelo que para prevenir o aparecimento de microorganismos durante a distribuição de água pode fazer-se uma cloragem de baixos níveis. Se uma água contiver brometos a utilização de ozono, origina a formação de

bromatos, composto este que segundo a Organização de Mundial de Saúde (O.M.S.) é carcinogénico. A O.M.S. também refere que este composto não deve estar na água em concentrações superiores 1 µg/l. A remoção do bromato só pode ser feita utilizando uma filtração com membrana, que é também muito dispendiosa.

A outra alternativa em termos de desinfecção de águas é a radiação UV. Consegue-se com lâmpadas que emitem radiação de comprimentos de onda que variam entre os 250 e 265 nm. Estas lâmpadas encontram-se dentro de câmaras de aço inoxidável. É um método realmente efectivo, mas só pode ser usado em sistemas de distribuição muito pequenos em que a probabilidade de contaminação seja muito pequena, podendo também ser utilizado ao nível doméstico.

### 3.2. Esquemas de tratamento de águas destinadas a consumo humano

Geralmente e salvo determinadas excepções, a água existente na Natureza que é utilizada para consumo humano, tem que sofrer um esquema de tratamento adequado às suas características, que podem ser determinadas mediante a sua análise. As águas utilizadas para abastecimento são na esmagadora maioria águas superficiais doces e águas subterrâneas. Seguidamente serão apresentados alguns esquemas possíveis de tratamento de águas subterrâneas, que dadas as suas características exigem tratamentos pouco complexos.

O esquema da figura 1 será para uma água que naturalmente possua boas características, sendo necessária apenas uma desinfecção

como prevenção para eventuais contaminações que possam surgir no percurso de distribuição. Como foi referido no ponto 2, as águas subterrâneas dissolvem metais com muita facilidade pelo que a sua remoção poderá ser feita com o tratamento esquematizado na figura 2. Na figura 3, o tratamento esquematizado destina-se a uma água muito dura, isto é, com elevadas concentrações de cálcio e magnésio.

As águas superficiais têm um esquema de tratamento mais complexo dos quais se apresenta um exemplo de tratamento de água de uma albufeira ou lago, tendo em vista o consumo humano (figura 4).

Estes esquemas de tratamento consistem em várias operações que devem ser definidas de acordo com as características da água a utilizar para abastecimento.

Durante a distribuição a água



Fig. 1 - Desinfecção da água captada



Fig. 2 - Remoção de ferro e manganês

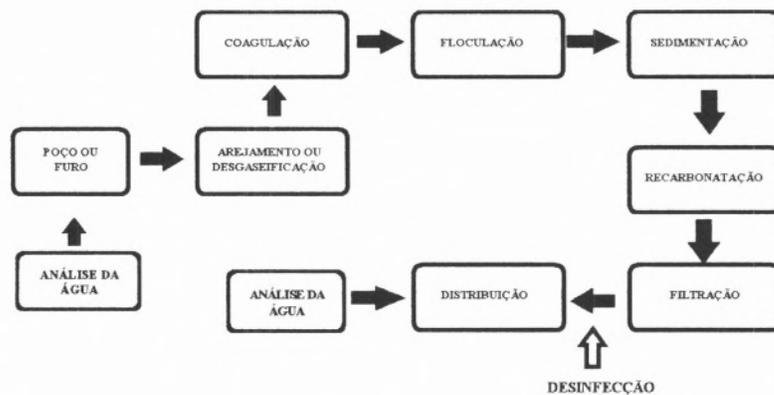


Fig. 3 - Abrandamento por precipitação

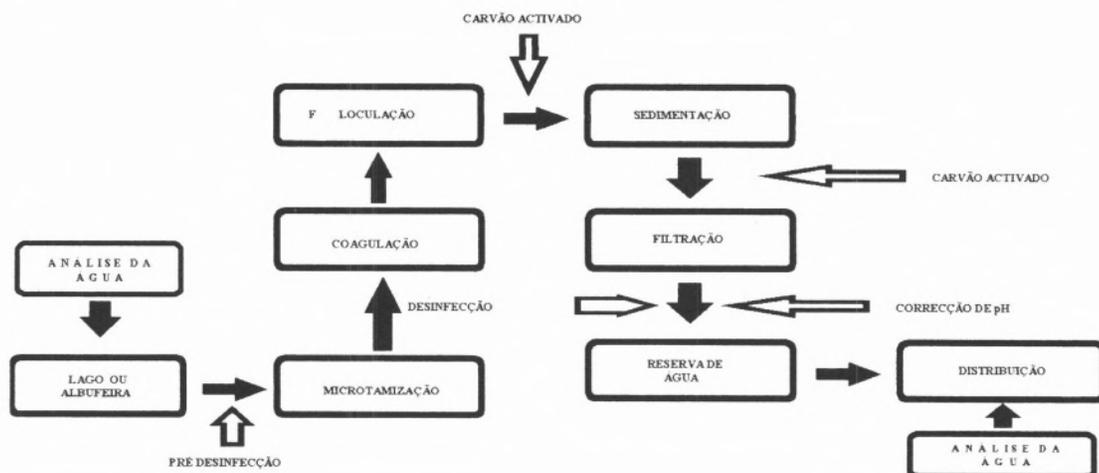


Fig. 4 - Tratamento de água de um lago ou albufeira

deve ser analisada com a frequência estabelecida no diploma legal criado para o efeito (Decreto-Lei 74/90, de 7 de Março). Neste diploma constam os parâmetros a analisar consoante a origem da água e o fim a que se destina (recreativos, piscícolas, rega, consumo humano e águas residuais); os valores máximos recomendáveis (VMR) e admissíveis (VMA) e no caso da água se destinar ao consumo humano o número e a frequência das análises a realizar de acordo com o número de consumidores a abastecer.

#### 4. CONCLUSÃO

Para que se possa fazer um cor-

recto tratamento de uma determinada água destinada ao consumo humano, além de um conhecimento profundo de todos os fenómenos físicos e químicos que estão envolvidos nas diferentes operações de tratamento, é necessário que a Estação de Tratamento de Água (ETA) tenha sido correctamente dimensionada.

É por esta razão, que pessoalmente acredito na necessidade da constituição de equipas pluridisciplinares que permitam uma abordagem de todos os problemas relacionados com o tratamento da água e com a construção das infraestruturas suportes da ETA.

<sup>1</sup> Técnico Superior dos Serviços Municipalizados de Santarém, licenciado em Bioquímica, Pós-Graduado em Qualidade da Água e Controlo de Poluição pela Universidade de Coimbra - Serviços Municipalizados de Santarém Praça Visconde Serra do Pilar 2000 SANTARÉM (tel: 043-3005050; fax: 043-3005051)

#### BIBLIOGRAFIA

N. F. Gray, *Drinking Water Quality - problems and solutions*, John Wiley & Sons, 1996

J. M. Vieira, *Tratamento de Água de Abastecimento*, Apontamentos para o Mestrado em Hidráulica e Recursos Hídricos da Universidade de Coimbra, 1997

Decreto-Lei 74/90, 7 de Março

# A Microextração em fase sólida como técnica de preparação de amostras para cromatografia

ANA LUÍSA SIMPLÍCIO<sup>1,2</sup>, LUÍS VILAS BOAS<sup>3,4</sup>

Com este trabalho pretende-se fazer a divulgação da microextração em fase sólida, que é uma técnica que permite fazer pré concentração de compostos para análise por cromatografia em fase gasosa e em fase líquida, sem que seja necessário recorrer ao uso de solventes orgânicos. A técnica tem sido usada principalmente para análise de resíduos de pesticidas em águas, mas actualmente surgem cada vez mais outros tipos de aplicações.

## INTRODUÇÃO

A análise de compostos orgânicos (componentes ou contaminantes) em amostras ambientais ou de produtos agroalimentares exige normalmente múltiplos passos de processamento com um elevado consumo de solventes orgânicos [1,2]. Essas análises são, por isso, morosas e estão sujeitas a numerosas interferências [3].

A microextração em fase sólida [4] (MEFS) é uma técnica recente de extração e pré-concentração de compostos orgânicos a partir de amostras de ar, água, produtos agroalimentares e fluidos biológicos (sangue, urina, soro), em que não é necessária a utilização de solventes orgânicos.

A amostra é mantida em contacto com uma fibra revestida de um material adsorvente durante o intervalo de tempo suficiente para reter os compostos que vão ser analisados. A fibra é depois introduzida no injetor de um cromatógrafo de fase gasosa onde se dá a dessorção térmica. Encontram-se também já descrições da associação da microextração em fase sólida à cromatografia em fase líquida.

O tempo global da análise é significativamente menor que no caso dos métodos que fazem uso da extração líquido-líquido ou de outros processos de extração sólido-líquido. A manipulação da amostra tam-

bém é menor pelo que se reduz a probabilidade de contaminações cruzadas ou perda de componentes.

A técnica é potencialmente interessante para aplicação na análise de resíduos de pesticidas em amostras ambientais e na caracterização de aromas em produtos agroalimentares.

O processo de extração é, no entanto, sensível a interferências da matriz o que limita a aplicação do método a amostras relativamente "limpas".

## HISTÓRIA

Aparentemente, a microextração em fase sólida surgiu da tentativa de Pawliszyn, em 1987, desenvolver um novo sistema de injeção em cromatografia em fase gasosa, que reduzisse os problemas de resolução de picos de compostos de baixa volatilidade [5,6].

Os primeiros dispositivos de microextração em fase sólida [5] (1990) foram construídos artesanalmente por substituição do filamento de uma seringa Hamilton 7000 por uma fibra óptica não revestida ou revestida com poliimida. Em 1992 a Varian associou-se aos inventores do sistema na tentativa de automatizar o método por adaptação das seringas Hamilton modificadas aos injectores automáticos dos seus cromatógrafos [7].

Em 1993 surgiram os primeiros artigos em que se faz referência à utilização de outros tipos de revestimento [8] e à análise de espaço de cabeça ("headspace") [9]. Só a partir de 1994, com o aparecimento dos primeiros dispositivos não artesanais de MEFS [9], comercializados pela Supelco, é que outros grupos [10-15] que não o de Pawliszyn começaram a utilizar a microextração em fase sólida. Em 1995 Pawliszyn associou a técnica de MEFS à cromatografia em fase líquida [16], desenvolvendo uma interface que passou a ser comercializada pela Supelco [17] em 1996. Neste ano já numerosos grupos aplicavam a microextração a diferentes matrizes e compostos.

## TEORIA

O princípio da MEFS é a partição do composto a analisar entre a matriz e o meio de extração [9]. Usando um revestimento polimérico, a quantidade de composto adsorvida pelo revestimento no equilíbrio está directamente relacionada com a sua concentração na amostra [18]:

$$n = \frac{K_f V_f C_0 V_s}{K_f V_f + V_s}$$

onde  $n$  é a massa do composto absorvida,  $V_s$  e  $V_f$  são os volumes da amostra e do revestimento,  $K_f$  é o coeficiente de partição do composto entre o revestimento e a amostra e  $C_0$  é a sua concentração inicial.

Se o volume de amostra for significativamente superior ao volume do revestimento, então a expressão pode simplificar-se para:

$$n = K_f V_f C_0$$

Se o revestimento tiver uma grande afinidade ( $K_f$  elevado) então a MEFS tem grande capacidade de concentrar o composto conduzindo a uma boa sensibilidade.

A velocidade da extração é controlada pelo transporte de massa dos compostos a analisar da amostra para o revestimento e depende do movimento convectivo no ar ou líquido em análise, da velocidade de dessorção de superfícies sólidas (quando presentes) e da velocidade de difusão no revestimento. Numa análise directa numa solução sem partículas em suspensão, o passo limitante será apenas a difusão no revestimento, desde que a amostra seja perfeitamente agitada.

A adsorção é afectada por numerosos factores incluindo o tamanho da molécula, a sua polaridade e a polaridade da matriz, a solubilidade e o pH [14]. Para fenómenos de adsorção e no caso de moléculas com estruturas semelhantes, em geral, quanto maior for a molécula mais fortemente é adsorvida. Esta situação

que é verificada por exemplo para as  $\gamma$ -lactonas com uma fibra apolar [14], também pode ser explicada em termos do decréscimo da polaridade com o tamanho da cadeia.

O efeito da polaridade também se observa nas adsorções relativas de álcoois e ésteres, em que se verifica que a derivatização de álcoois a ésteres, com conseqüente diminuição da polaridade, conduz a um aumento da adsorção [14].

Em fibras de revestimento apolar como polidimetilsiloxano, os ácidos são fracamente adsorvidos [13]. Isto acontece porque a forma iónica do ácido é demasiado hidrofílica para ser adsorvida na superfície hidrofóbica da fibra; como a razão de concentrações da forma iónica e da forma neutra do ácido é dependente do pH do meio, a adsorção do ácido que só pode ser feita na forma neutra, também depende do pH.

Para que uma molécula seja adsorvida, ela tem que ser dessolvada primeiro. A entalpia global do processo é a diferença entre a entalpia de adsorção e a entalpia de solvatação. Sendo assim o processo é tanto mais favorável quanto menor for a entalpia de solvatação ou seja quanto menos solúvel na matriz for o composto [14].

## APLICAÇÕES DESCRITAS

Em amostras ambientais (ar, água, águas residuais) têm sido relatados resultados de análise de poluentes como resíduos de pesticidas [10,18], PHAs [4], BTX [7,4], organometálicos voláteis [11], ácidos gordos [20], fenóis [8,18,19], etc. Os limites de detecção típicos são inferiores a 1 ppb para muitos compostos [18], nomeadamente variam entre 10 ppt e 1.6 ppb para os fenóis [8] e são inferiores a 50 ppt para vários pesticidas organofosforados [10, 15]. Para ácidos gordos, os limites de detecção referidos variam entre 20 ppt e 760 ppb e diminuem com o aumento da cadeia apolar do ácido [20]; os desvios padrão relativos são quase sempre inferiores a 5%.

Encontram-se também referências à possibilidade de aplicação do método directamente no campo, em que a fibra é exposta ao ar ou água e depois transportada para o laboratório. Em produtos agroalimentares são poucas as aplicações descritas da MEFS para análise de resíduos de pesticidas [21,22]; limites de detecção típicos para pesticidas organofosforados são da ordem das 50 ppt em sumo de maçã [21] e da ordem das 5 ppb em néctares de frutos e sumos de frutos não clarificados [22]; as percentagens de recuperação nestas matrizes são da ordem de 70-110%.

Em produtos agroalimentares a MEFS tem sido usada fundamentalmente para caracterização de aromas [13,14] com vista à classificação de variedades de tabaco [23], ervas aromáticas [24], bebidas alcoólicas [12,25], especiarias [26], cafés e sumos de frutos [13].

Em fluidos biológicos têm-se tentado quantificar resíduos de pesticidas mas os resultados apresentam percentagens de recuperação baixas [27]. O método também já foi aplicado na pesquisa de anfetaminas em urina [23] e medicamentos antidepressivos no soro [28].

Encontram-se ainda descrições da aplicação da MEFS na pesquisa de combustíveis líquidos em investigação de fogos [29,30].

## PROCESSO EXPERIMENTAL

Neste método, uma fibra de sílica revestida de um material polimérico adsorvente, é exposta à amostra directamente por imersão (amostras líquidas e gasosas) ou ao espaço de cabeça (todo o tipo de amostras). Segue-se a dessorção dos compostos retidos no injector de um cromatógrafo de fase gasosa por acção da temperatura, sem a utilização de qualquer solvente orgânico. O método não exige equipamento sofisticado. Na figura pode ver-se a estrutura das seringas de MEFS disponíveis actualmente no mercado.

Caso se pretenda utilizar a cromatografia de fase líquida como técnica de separação dos compostos adsorvidos, a fibra é introduzida numa interface muito simples associada à válvula de seis vias ligada ao cromatógrafo.

A dessorção é feita por contacto da fase móvel [17] (dessorção dinâmica). Em alternativa, caso não se disponha desta interface, a fibra pode ser introduzida num volume pré definido de fase móvel ou outro solvente que é depois injectado na coluna da forma habitual (dessorção estática) [17]. Nestes casos são necessárias fibras de fase ligada que não se degradem com solventes orgânicos.

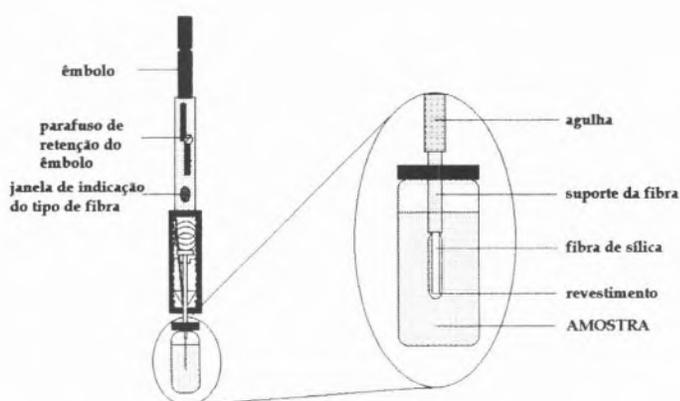


Fig. 1 - Seringa e fibra para MEFS

Alguns parâmetros podem ser ajustados com vista a otimizar as condições de extracção por MEFS:

É necessário escolher o tipo de revestimento adequado para a análise em questão. As fibras de MEFS correntemente disponíveis no mercado são revestidas por diferentes espessuras das seguintes fases: poliacrilato (PA), polidimetilsiloxano (PDMS), polidimetilsiloxano/divinilbenzeno (PDMS/DVB), carbowax/divinilbenzeno (CW/DVB) [31] e Carboxen™/polidimetilsiloxano (CAR/PDMS) [32]. Cada fibra é indicada para grupos de compostos diferentes [31]: a fibra de 100 µm de PDMS é a mais adequada para compostos voláteis de baixo peso molecular, enquanto que a de 7 µm é mais adequada para semivoláteis (peso molecular um pouco maior). Para compostos polares de matrizes polares, as fibras de PA ou de CW/DVB são mais adequadas, enquanto que a fibra de PDMS/DVB adsorve mais eficientemente compostos voláteis polares pelo que é indicada para álcoois e aminas. Como exemplo, pode citar-se o caso de alguns pesticidas organofosforados como o fosmete e o azinfos-metilo para os quais a fibra de PDMS/DVB tem uma capacidade de concentração cerca de 10 vezes superior à da fibra mais habitualmente usada (PDMS) [21]. A fibra de CAR/PDMS é a mais indicada para a extracção de moléculas muito pequenas que não são extraídas com a fibra de PDMS como o dióxido de enxofre por exemplo.

Só algumas fibras permitem a imersão em matrizes orgânicas dado que, na maior parte dos casos as fases são não ligadas.

O tempo de exposição da fibra à amostra deve ser suficiente para que uma quantidade significativa dos compostos em análise seja adsorvida. Idealmente nesse intervalo de tempo deve atingir-se o equilíbrio na distribuição dos compostos entre a amostra e o revestimento para que o método não seja tão sensível a pequenas variações no tempo de exposição.

O tempo necessário para atingir o equilíbrio pode ser relativamente longo [7], mas pode ser reduzido se se acelerar o processo de difusão na fase líquida por agitação da amostra. Em geral, quanto maior a velocidade de agitação, menor o tempo necessário para adsorver uma maior quantidade de composto [15]. Normalmente, 15 a 30 minutos são suficientes para concentrar na fibra uma massa significativa do composto a analisar [15]. Para velocidades de agitação muito elevadas pode haver no entanto, redução da massa adsorvida [7]. A agitação pode ser feita por ultrasons [33] ou com agitador magnético. Os limites de detecção e os desvios padrão relativos também melhoram com a agitação da amostra [15].

O volume de amostra é importante na medida em que a quantidade adsorvida pela fibra é função do volume e das concentrações iniciais. Extracções sucessivas provocam o decréscimo da concentração das soluções analisadas [7,13], principalmente se o volume e as concentrações iniciais forem reduzidas e as constantes de distribuição forem elevadas.

Em geral, a adição de um electrólito pode alterar um processo de adsorção de duas formas [13]: ou por alteração da superfície entre fases ou por decréscimo da solubilidade de compostos hidrofóbicos na fase aquosa. Aumentando a força iónica do meio por adição de sais podem aumentar-se as constantes de distribuição no sentido da adsorção e assim diminuir os limites de detecção. O tempo necessário para atingir o equilíbrio em soluções não agitadas pode aumentar significativamente na medida em que maior quantidade dos compostos será deslocada para a fibra [7].

A temperatura do injector do cromatógrafo de fase gasosa pode influenciar a área dos picos dos compostos em análise [7], mas essa influência dependerá do tipo de compostos. Deverá ser suficientemente elevada para volatilizar os compostos adsorvidos sem os degradar. O

tempo que a fibra permanece no injector do cromatógrafo de fase gasosa deve ser suficiente para que a totalidade dos compostos seja desorvida, ou seja, para que não haja efeitos de memória nas injeções seguintes. Em geral 1 a 2 minutos são suficientes na maior parte das situações.

A elevação da temperatura de exposição desfavorece o processo de adsorção pela fibra e aumenta a solubilidade dos compostos hidrofóbicos na solução. Assim, para temperaturas superiores à temperatura ambiente observa-se em geral o decréscimo da massa adsorvida [7]. Por outro lado, para temperaturas baixas (da ordem dos 5°C) também há diminuição das áreas obtidas em relação às que se obtêm à temperatura ambiente, o que pode ser explicado pelo decréscimo da difusão [7]. Estas observações são no entanto dependentes do tempo de exposição e da agitação da amostra na medida em que, quando há agitação ou para tempos de exposição longos em que se está mais perto do equilíbrio, a sensibilidade a variações na temperatura é menor.

## LIMITAÇÕES DO MÉTODO

Algumas limitações podem ser apontadas à MEFS, nomeadamente, o estado físico da amostra. O método pode ser aplicado directamente a amostras no estado gasoso e a líquidos mas, para amostras no estado sólido só é possível a análise em espaço de cabeça. Outra limitação é a relativamente reduzida especificidade das fibras que leva a que, conjuntamente com os compostos em análise, sejam extraídos outros que podem causar interferência na análise cromatográfica. Usando detectores específicos, é possível de algum modo "filtrar" a interferência se os compostos em análise forem susceptíveis de ser analisados por um detector específico. Como exemplo pode referir-se o caso dos compostos organofosforados que podem ser analisados por um detector sensível ao fósforo, mas no qual os compostos sem fósforo não

são detectados. Esta é uma das razões por que o método tem sido mais usado em amostras em que a matriz não interfere significativamente como no caso da água.

A presença de compostos não voláteis como óleos e outras moléculas de elevado peso molecular em solução juntamente com os compostos em análise pode interferir na MEFS directa [9]. Esse facto poderá dever-se à formação de uma outra fase que compete pelo composto em análise, ou à ligação desses compostos à fibra.

A presença de partículas sólidas em suspensão em soluções líquidas pode também prejudicar a MEFS por impedimento à difusão ou por adsorção dos compostos em análise que vêm assim reduzida a sua concentração livre [22]. No entanto, como a capacidade de extracção das fibras é muito elevada, é possível diluir as amostras de modo a reduzir a concentração de partículas interferentes sem comprometer significativamente a sensibilidade do método [21].

## CONCLUSÕES

A grande vantagem deste método é a sua simplicidade: podem usar-se pequenas quantidades de amostra (típicamente da ordem de 1 a 10 ml) e o seu manuseamento é muito reduzido; o processo de extracção é rápido; o equipamento utilizado é reduzido e de custos moderados e as fibras podem ser reutilizadas muitas vezes, ao contrário de extracção em fase sólida em que cada "cartridge" só pode ser usado uma vez; não é necessário utilizar solventes orgânicos que acarretam problemas de toxicidade e dificuldades de eliminação. Assim, numerosas interferências [3] que são habituais com outros métodos de extracção sólido-líquido ou líquido-líquido, e que são em parte oriundas do processo analítico podem ser evitadas. Como exemplos podem referir-se as interferências introduzidas por solventes orgânicos, materiais de vidro e plástico, material de filtração e adsorventes de ex-

tracção em fase sólida bem como as contaminações cruzadas e perdas de compostos. A frequência de limpeza do injector do cromatógrafo de fase gasosa também pode ser menor porque apenas os compostos voláteis que desorvem termicamente da fibra são introduzidos no injector. Por esta razão, também os tempos de vida útil das colunas são maiores.

Para muitos compostos a capacidade de extracção das fibras é elevada permitindo atingir factores de concentração elevados com uma pequena quantidade de amostra. Podem assim atingir-se limites de detecção mais baixos que com outros métodos.

<sup>1</sup> Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica, Apartado 12, 2780 Oeiras.

<sup>2</sup> Faculdade de Farmácia de Lisboa, Av. das Forças Armadas, 1600 Lisboa.

<sup>3</sup> Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1096 Lisboa Codex.

<sup>4</sup> Instituto de Tecnologia Química e Biológica, Apartado 127, 2780 Oeiras.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ed. Hans-Peter Thier & Hans Zeumer; working group "Analysis", *Manual of Pesticide Residue Analysis*, vols. 1 & 2, VCH, 1987.
- General Inspectorate for Health Protection, *Analytical Methods for Pesticide Residues in Foodstuffs*, 6<sup>o</sup> ed. Min. of Public Health, Welfare and Sport, The Netherlands, 1996.
- Lino, C.M.; Silveira, M. I. N.; **62**, 1996, 19-25.
- Zhang, Z.; Yang, M. J.; Pawlizyn, J.; *Anal. Chem.*, **66**, 1994, 844A-853A.
- Pawlizyn, J.; Liu, S.; *Analytical Chemistry*, **59**, 1987, 1475-1478.
- Arthur, C.; Pawlizyn, J.; *Analytical Chemistry*, **62**, 1990, 2145.
- Arthur, C.L.; Killam L.M.; Buchholz, K.D.; Pawlizyn, J.; Berg, J. R.; *Anal. Chem.*, **64**, 1992, 1960-1966.
- Buchholz, K.; Pawlizyn, J.; *Environ. Sci. Technol.*, **27**, 1993, 2844.
- Zhang, Z.; Yang, M. J.; Pawlizyn, J.; *Anal. Chem.*, **65**, 1993, 1843-1852.
- Eisert, R.; Levens K.; *Fresenius J. Anal. Chem.*, **351**, 1995, 555-562.
- Tutschku, S.; Mothes S.; Wennrich, R.; *Fresenius J. Anal. Chem.*, **354**, 1996, 587-591.
- Vas, G.; *The Reporter*, 15(5), 1996, 6-7.
- Yang, X.; Peppard, T.; *J. Agric. Food Chem.*, **42**, 1994, 1925-1930.
- Yang, X.; Peppard T.; *LC - GC*, 13 (11), 1995, 882-886.
- Simplicio, A. L.; Vilas Boas, L.; *1st European Pesticide Residue Workshop*, 1996.
- Chen, J.; Pawlizyn, J.; *Analytical Chemistry*, **67**, 1995, 2530-2533.
- Shirey, R.; Nolan, L.; Mindrup, R.; *The Reporter*, 15(5), 1996, 8-9.
- Eisert, R.; Levens K.; *J. Chromatography A* 733, 1996, 143-157.
- Schäfer, B.; Engwald, W.; *Fresenius J. Anal. Chem.*, **352**, 1995, 535-536.
- Pan, L.; Adams, M.; Pawlizyn, J.; *Anal. Chem.*, **67**, 1995, 4396-4403.
- Simplicio, A. L.; Vilas Boas, L.; *Actas do 3<sup>o</sup> Encontro de Química de Alimentos*, 1997, 339.
- Simplicio, A. L.; Vilas Boas, L.; *Actas do X Encontro Luso-Galego de Química*, Novembro de 1996.
- Mindrup, R.L.; *Supelco-rep.*, **14** (6), 1995, 1-3.
- Nunes, V.; Paixão, P.; Pica, C.; Martins, A.; Dias, A.; Vilas Boas, L.; *Actas do 3<sup>o</sup> Encontro de Química de Alimentos*, 1997, 416.
- Lay-Keow Ng; Hupé, M.; Harnois, J.; Moccia, D.; *J. Sci. Food Agric.*, **70**, 1996, 380-388.
- Miller, K.G.; Poole, C.F.; Pawlowski, *Chromatographia*, **42** (11/12), 1996.
- Lee, X.P.; Kumazawa, T.; Sato, K.; Suzuki, O.; *Chromatographia*, **42** (3-4), 1996, 135-140.
- G. Gora-Maslak; *The Reporter*, **15** (6), 1996, 1-2.
- Furton, K.G.; Almirall, J.R.; Bruna, J.C.; *J. of Forensic Science*, **41**(1), 1996, 12-22.
- Steffen, A.; Pawlizyn, J.; *Anal. Commun.*, **33**(4), 1996, 129-131.
- Chromatography products, *Supelco catalog* 1996, 373-375.
- Shirey, R.; *The Reporter*, **16** (1), 1997, 7.
- Motlagh, S.; Pawlizyn, J.; *Analytica Chimica Acta*, **284**, 1993, 265-273.

# As Novas Tecnologias de Informação no Ensino da Química: Proposta de uma aplicação de *software* hipermedia para o estudo da "Constituição da Matéria" no 8º ano de escolaridade

MARIA DA CONCEIÇÃO CLAVEL<sup>1</sup> · MARIA DA CONCEIÇÃO DUARTE<sup>2</sup>

Investigações recentes têm revelado que estudantes, de vários graus de escolaridade, conceptualizam a matéria como sendo "contínua e estática". É nossa convicção que as representações estáticas vulgarmente utilizadas para ilustrar o modelo cinético-molecular não facilitam a alteração deste tipo de conceptualização. Partindo deste pressuposto desenvolveu-se uma aplicação de *software* hipermedia que incluía animação (Clavel, 1996) e que foi utilizada no ensino/aprendizagem do tópico "Constituição da matéria", do 8º ano de escolaridade. Constitui objectivo deste artigo apresentar a referida aplicação. Procuraremos ilustrá-la com alguns ecrãs, deixando, contudo, à imaginação do leitor a animação que neste texto não é possível reproduzir.

## 1. INTRODUÇÃO

A investigação em educação tem dado ênfase a duas linhas que, sendo diferentes, se podem entrecruzar para atingir uma aprendizagem mais significativa e actual da ciência. Uma delas, tem-se baseado na problemática das concepções alternativas dos alunos, procurando desenvolver estratégias de ensino/aprendizagem que levem a uma efectiva mudança conceptual (por ex. Driver et al., 1985; Osborne e Freyberg, 1985). A outra, que pode estar directamente ligada ao desenvolvimento de *software* educativo, pretende determinar "como pode a tecnologia ser usada para uma melhoria fundamental na educação" (Branson, 1990, p.10), nomeadamente na educação em ciência.

A Química é uma das áreas da ciência que contém vários assuntos cuja correcta conceptualização parece apresentar dificuldades para uma

percentagem significativa de alunos de diferentes níveis de ensino. De entre eles salienta-se, com particular incidência, o conceito de descontinuidade da matéria, fundamental não só na interpretação de vários fenómenos físicos e químicos como também na interpretação da modificação de algumas condições ambientais.

Na base quer de algumas das dificuldades sentidas pelos alunos quer na persistência de algumas concepções alternativas, nomeadamente a de "matéria como algo contínuo e estático" (Brook et al., 1984; Nussbaum, 1985; Renstrom, 1987; Andersson, 1990), poderão estar as representações estáticas vulgarmente utilizadas para ilustrar a estrutura da matéria.

A hipótese que motivou o desenvolvimento do estudo que realizámos foi, assim, a seguinte:

*Uma aplicação de software hipermedia que proporcione, através do recurso à animação, uma representação mais fiel da estrutura microscópica da matéria pode facilitar a compreensão dos seguintes aspectos da teoria cinético-molecular: (a) as partículas que constituem toda a matéria estão em constante movimento e (b) os espaços entre as partículas estão vazios.*

Convém definir antes de prosseguirmos o entendimento que fazemos de hipermedia.

A palavra "hipertexto" foi inventada nos anos 60 por Theodore Nelson, não atribuindo ao prefixo "hiper" o significado de "super", mas sim o de "expandido", "generalizado", pressupondo um processo de escrita/leitura não linear (Gomes et al., 1990; Jonassen, 1989). Pode então inferir-se que "Hipertexto" se distancia do "Texto" precisamente por não impor uma sequência de leitura linear implícita neste último "podendo, no entanto, incluir imagens tais como diagramas, tabelas e figuras, mas não animação, vídeo ou som (...)" Desta forma os media aceites num hipertexto serão os que ficam estáticos, como o estariam na

página de um livro" (Tolhurst, 1995, p. 25).

Nos hipermedia esta sequência não linear de obter informação, além do texto e das imagens paradas, é completada com outros meios de comunicação tais como vídeo, animação e som.

A aplicação realizada para este estudo, por conter ligações entre nós de informação, e incluir texto, imagens paradas e animação, sendo toda esta informação apresentada recorrendo à utilização do computador, parece poder enquadrar-se dentro da definição de hipermedia.

## 2. METODOLOGIA

### 2.1. Amostra

O estudo envolveu 57 alunos do 8º ano de escolaridade, distribuídos por duas turmas - experimental e controlo. A primeira incluiu um total de 29 alunos, sendo 8 do sexo feminino e 21 do sexo masculino; a turma controlo incluiu 28 alunos, sendo 18 do sexo feminino e 10 do sexo masculino.

### 2.2. Sequência de ensino

#### 2.2.1. Pressupostos teóricos

A sequência de ensino inseriu-se num paradigma construtivista da aprendizagem, e foi elaborada tendo em vista a prossecução de um modelo de mudança conceptual que pressupõe os seguintes passos: (a) Apresentação de um problema; (b) Identificação/consciencialização das ideias perfilhadas pelos alunos relativamente ao problema colocado; (c) Proporcionar situações que possibilitem aos alunos testar algumas das suas ideias prévias; (d) Fornecer informações relevantes que permitam aos alunos confrontar as suas ideias com os conhecimentos científicos; (e) Proporcionar oportunidades que desafiem os alunos a reflectir sobre a

evolução das suas ideias e procedimentos; (f) Proporcionar oportunidades para que os alunos possam aplicar as novas ideias na explicação de vários fenómenos.

A metodologia adoptada procurou conseguir uma situação de compromisso entre uma metodologia que considera não ser necessário nem defensável levar os alunos a redescobrir a existência de partículas, devendo estas ser apresentadas como um facto (Barboux et al., 1987), e uma metodologia que defende a necessidade de induzir nos alunos o conflito cognitivo através da aplicação das suas ideias em situações problemáticas para as quais não dêem uma resposta satisfatória (Nussbaum, 1985).

#### 2.2.2. Estrutura

Partindo do pressuposto de que a introdução ao estudo da teoria cinético-molecular deve ser feita a partir de fenómenos descritos a nível macroscópico, a planificação da primeira unidade do programa de Química do 8º ano de escolaridade - "Nós e o Mundo Material" - foi feita com base em fichas de trabalho com as quais se pretendeu, através da realização de experiências seleccionadas, fornecer aos alunos a oportunidade para observar e descrever a nível macroscópico um determinado número de fenómenos. Com a realização das actividades propostas nas fichas os alunos deveriam ter oportunidade de: (a) estudar algumas propriedades físicas dos gases, líquidos e sólidos; (b) aprender a distinguir substâncias de misturas de substâncias; (c) preparar soluções; (d) determinar os pontos de fusão e de ebulição da água e a densidade de vários materiais; (e) utilizar os pontos de fusão e de ebulição e a densidade como critérios de pureza; (f) aprender técnicas de separação dos constituintes de misturas.

O início do estudo da segunda unidade programática - "Substâncias Químicas: o que são e o que se faz com elas" - deveria permitir encontrar uma explicação plausível para os fenómenos anteriormente estudados mas agora através da utilização de

um modelo de partículas. O estudo desta unidade incluiu, por isso, a utilização da aplicação hipermedia, com a qual se pretendeu facilitar aos alunos a compreensão e aplicação do referido modelo. A utilização da aplicação foi intercalada com a realização de fichas de trabalho que tinham entre outros os seguintes objectivos: (a) sistematizar e aplicar os conceitos abordados na aplicação; (b) avaliar o progresso dos alunos, em termos de mudança conceptual, ao longo ao sequência de ensino.

### 2.3. Implementação da sequência de ensino

A implementação na sala de aula da sequência de ensino incluiu, como já foi referido, a utilização pelos alunos das aplicações hipermedia. Estas, sumariamente descritas a seguir, diferiam apenas no facto da utilizada pela turma experimental possuir animação enquanto que a utilizada pela turma de controlo não evidenciar em nenhuma circunstância o movimento das partículas.

Esta fase teve a duração de um mês.

Cada turma foi dividida em 10 grupos de trabalho formados espontaneamente. Este número foi determinado pelo número de computadores disponíveis e por se considerar conveniente que os grupos fossem os mesmos em todas as aulas.

As opiniões de cada grupo eram discutidas na turma de forma a explicitar as ideias relevantes que se pretendia fazer emergir com cada uma das situações problemáticas.

## 3. AS APLICAÇÕES HIPERMEDIA

### 3.1. Construção

O software utilizado para construir as aplicações foi o ToolBook 1.5., tendo-se em consideração os seguintes aspectos:

#### A. Conteúdos

Tendo em atenção os aspectos metodológicos anteriormente referi-

dos foi decidido dividir as aplicações em duas partes principais - "As Partículas" e os "Estados Físicos" - estando cada uma delas subdividida em quatro módulos.

A entrada em cada uma destas partes e em cada um dos módulos pode ser feita de forma não sequencial, através do acesso a dois menus semelhantes aos apresentados nas figuras 1.1 e 1.2. A escolha dos temas sugeridos pelo menu apresentado na primeira figura vai dar acesso, respectivamente, a um dos dois sub-menus apresentados na segunda figura.

Os objectivos que se pretendiam atingir com cada módulo determinaram a sua estrutura, como a seguir se especifica:

a) A natureza dos conteúdos inseridos na primeira parte ("As Partículas") e a forma axiomática como foi decidido abordá-los, determinaram que todas as informações consideradas indispensáveis para a aquisição dos conceitos abordados possam

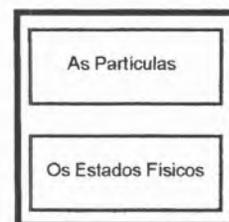


Fig. 1.1 - Menu inicial da aplicação

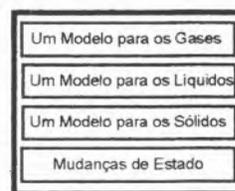
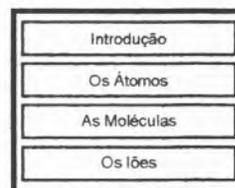


Fig. 1.2 - Sub-menus da aplicação

ser obtidas seguindo um percurso linear, não só dentro de cada módulo como na passagem de um módulo para outro. O aprofundamento de certos aspectos pode ser feito seguindo ramificações deste percurso.

b) Na segunda parte da aplicação - "Os Estados Físicos" - a estrutura dos três últimos módulos é perfeitamente linear. Tal não acontece com o primeiro - "Um Modelo para os Gases" - uma vez que neste caso o percurso seguido pelos alunos deverá depender das ideias alternativas por eles perfilhadas. Assim, embora partindo de um mesmo problema inicial os alunos podem seguir caminhos diferentes para chegar a uma solução.

#### *B- Interface com o utilizador*

Destinando-se a aplicação a alunos do 8º ano de escolaridade (a maior parte dos quais sem prática na utilização de computadores), procurou-se que a interface com o utilizador e os processos de navegação utilizados fossem o mais simples possíveis de modo a não se tornarem num factor desviante dos objectivos a atingir.

A progressão na aplicação, seguindo percursos lineares, foi sempre proporcionada através de botões colocados na barra inferior do écran. Contudo, o acesso às ramificações foi conseguido navegando através de imagens, de palavras-chave incluídas no texto ou de botões incluídos na parte central do écran.

#### *C- Ajudas à navegação*

As ajudas implementadas para facilitar a utilização da aplicação foram variadas, incluindo: (a) introdução de um módulo inicial contendo explicações sobre a forma como se poderá aceder à informação navegando através de botões, imagens ou palavras-chave; (b) informação disponibilizada sob a forma de texto colocado em balões sempre que o apontador do rato passa por cima de cada botão colocado na barra inferior do écran; (c) utilização da cor vermelha para as palavras chave escritas no texto; (d) mudança de forma do apontador do rato sempre que este passa por cima de uma palavra-chave ou de uma imagem através

das quais se pode aceder a informação suplementar (por ex. aparecimento de uma?).

#### *D- Auto-avaliação da aprendizagem*

A necessidade de colocar questões destinadas à auto-avaliação, que incluem perguntas de escolha múltipla e preenchimento de espaços em branco, apenas foi considerada pertinente para a primeira parte da aplicação uma vez que os conteúdos nela abordados são apresentados de uma forma predominantemente expositiva. Ao responder a estas questões os alunos recebem um feedback imediato através de mensagens de certo ou errado.

Na segunda parte da aplicação este feedback não foi permitido, uma vez que todas as respostas às questões colocadas se destinam a ser discutidas pelo grupo turma tendo em vista a troca de ideias que poderão levar os alunos a uma mudança conceptual.

#### *E - Registos dos percursos seguidos pelos alunos e das respostas dadas às questões colocadas ao longo da aplicação*

Foi criado um ficheiro onde ficam registados todos os passos seguidos pelos alunos ao percorrer a aplicação, bem como as respostas dadas às questões postas ao longo da mesma. Esta componente permite: (a) que o professor possa, depois da aula, verificar se a aplicação foi explorada de modo correcto pelos alunos, podendo sugerir, aos que não o fizeram, quais os pontos que deveriam ser revistos e ter uma ideia das dificuldades encontradas na compreensão dos assuntos abordados através das respostas dadas; (b) recolher material (através da impressão dos registos das respostas em papel) para promover a discussão das ideias alternativas ou ideias correctas explicitadas pelos alunos ao responder às questões colocadas na segunda parte da aplicação.

### **3.2. Descrição da aplicação**

Como já foi referido, com a primeira parte da aplicação - "As Partículas" - pretende-se que os alunos

adquiram os conceitos de átomo e molécula, para que a partir deles possam na segunda parte da aplicação construir modelos de agregação destas partículas capazes de explicar as propriedades físicas dos gases, líquidos e sólidos.

#### *Módulo 1 - Introdução*

Tendo por base o modelo de ensino para a mudança conceptual, anteriormente apresentado, a aplicação inicia-se com três questões que se pretende sejam explicadas à luz da descontinuidade da matéria:

- Por que motivo os gases são tão compressíveis?

- Por que motivo é muito difícil comprimir os líquidos e os sólidos?

- Como poderão ser explicadas as mudanças de estado físico?

Segue-se uma breve resenha das teorias que, ao longo dos séculos, foram sendo aceites pelas várias comunidades científicas numa tentativa de encontrar respostas para estas questões.

#### *Módulo 2 - Os átomos*

Neste módulo é introduzido o conceito de átomo, definido como a partícula fundamental da constituição da matéria. Uma vez que a constituição dos átomos não faz parte do programa de Química do 8º ano de escolaridade, apenas se refere que os átomos são constituídos por prótons, neutrões e electrões sendo apresentado o modelo de um átomo de hélio.

Numa tabela periódica os alunos podem obter informações sobre os símbolos químicos, nomes e estado físico dos elementos hoje conhecidos.

#### *Módulo 3- As moléculas*

Nesta unidade os alunos têm a possibilidade de agrupar alguns átomos (hidrogénio, hélio, azoto e oxigénio) numa tentativa de formar moléculas (Fig. 2).

Pretende-se, com esta actividade, que os alunos verifiquem e entendam que nem todos os átomos têm a capacidade para se ligar entre si. Assim, sempre que seleccionem um conjunto de átomos correspondente a uma molécula é-lhes dada informação sobre a molécula forma-

## AS MOLÉCULAS

Contudo, os átomos não se agrupam de qualquer maneira.

Para perceberes como os átomos se podem agrupar na formação das diferentes substâncias coloca um ou mais, iguais ou diferentes, dentro do rectângulo da direita. Se os que escolheste tiverem a capacidade de se ligar entre si obterás informações sobre a substância que corresponde a esse agrupamento.

Como a estrutura do átomo é bastante complicada, para simplificar podemos representá-los por pequenas esferas.



Fig. 2 - Reprodução do ecrã da aplicação destinado à introdução do conceito de molécula

da e qual a substância que lhe corresponde. Quando ao conjunto seleccionado não corresponde nenhuma molécula os átomos saltam do rectângulo de verificação para o lugar anterior.

A escolha dos elementos e a limitação do número de átomos disponibilizados (2 por cada elemento) baseou-se nos seguintes critérios: (a) necessidade de escolher elementos cujos agrupamentos correspondam a substâncias moleculares e não a substâncias iónicas; (b) garantir um número de átomos adequado para que os alunos compreendam que nem todas as ligações são possíveis.

### Módulo 4 - Os iões

É nossa opinião que o conceito de ião aparece extemporaneamente no programa de Química do 8º ano, uma vez que só pode ser perfeitamente entendido depois de um estudo mais aprofundado sobre a constituição dos átomos. Contudo, a intenção de construir uma aplicação que estivesse de acordo com o programa em vigor obrigou a que, embora de uma forma muito simplificada, este conceito fosse abordado.

Depois de uma explicação sobre a formação de iões à custa da transferência de electrões entre átomos de espécies químicas diferentes, existe um ecrã onde se podem obter informações sobre os iões que constituem algumas substâncias.

### Módulo 5 - Um modelo para os gases

Após a repetição da primeira questão posta no início da aplicação, "Porque motivo os gases são tão compressíveis?", os alunos são confrontados com quatro modelos de agregação de moléculas.

Os modelos presentes incluem um modelo correcto (modelo A) e três modelos construídos com base nas seguintes concepções alternativas descritas na literatura:

- não existência de espaços vazios entre as moléculas (modelos B e D);
- não existência de movimento (modelos B e D);
- distâncias demasiado pequenas entre as moléculas (modelos C e D).

Sempre que o utilizador coloca o apontador do rato sobre uma destas representações aparece um texto

com a explicitação dos aspectos que se pretendem salientar com cada uma (Fig. 3).

De entre estas quatro representações os alunos podem escolher aquela que, em sua opinião, melhor representa um gás (para simplificar, as moléculas consideraram-se monoatómicas). Na turma experimental, além do texto explicativo do modelo seleccionado os alunos podem ainda observar uma simulação do movimento das moléculas representadas nos modelos A e C.

Depois desta escolha podem verificar, através de simulações ("possibilidade de comprimir um gás contido num recipiente" e "possibilidade de abrir uma torneira que aumenta o volume do recipiente que contém um gás"), se o modelo escolhido é o mais conveniente para explicar a compressão e a expansão de um gás.

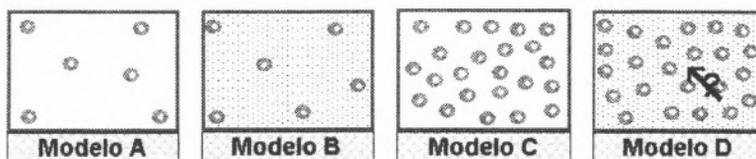
Nos casos em que o modelo escolhido não seja o mais apropriado para explicar os fenómenos pretendidos os alunos têm a oportunidade de reformular a sua escolha. Para evitar que esta escolha seja feita por tentativa e erro, sem que fique devidamente compreendida, as mudanças de opinião têm que ser justificadas. Nos casos onde as insuficiências do modelo escolhido não levem ao seu abandono, essas insuficiências são explicitadas, havendo a oportunidade de uma nova escolha. A persistência no primitivo modelo incorrecto conduz, então, à apresentação do modelo correcto.

### Módulo 6 e Módulo 7 - Um modelo para os líquidos e um modelo para os sólidos

Depois da construção de um modelo para os gases, capaz de explicar as suas propriedades macroscópicas, pretende-se que os alunos estendam aos líquidos e aos sólidos as relações semânticas estabelecidas entre estas propriedades e os vários aspectos do modelo que construiram. Neste caso a aplicação apenas serve para simular o modelo correcto e verificar até que ponto os alunos são capazes de estabelecer as pretendidas

### UM MODELO PARA OS GASES

Qual dos seguintes modelos melhor pode representar o que observarias se possuísses um microscópio tão potente que te permitisse ver as moléculas de um gás?



As moléculas não se movem

As distâncias entre elas são muito pequenas

Os espaços entre as moléculas não estão vazios



Fig. 3 - Reprodução do écran da aplicação com as representações de quatro modelos de agregação das moléculas de um gás e a informação correspondente ao modelo seleccionado.

relações entre as propriedades macroscópicas dos líquidos e dos sólidos e os vários aspectos do modelo apresentado. Tal como para os gases o movimento das partículas só foi simulado na aplicação utilizada na turma experimental.

#### Módulo 8 - Mudanças de Estado

Uma vez que no programa de Química do 8º ano de escolaridade consta o estudo das mudanças de estado e a interpretação dos respectivos gráficos de variação de temperatura em função do tempo, a aplica-

ção não podia terminar sem a simulação microscópica das mudanças de estado "sólido → líquido → gás" em simultâneo com a construção do gráfico  $T = f(t)$  (Fig. 4).

Tal como tem vindo a ser referido apenas na turma experimental foi simulado o movimento das partículas constituintes da hipotética substância representada.

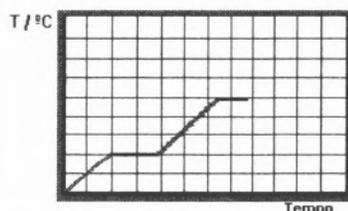
Após a observação da simulação e da construção do gráfico os alunos prosseguem para a sua análise através do botão "analisar gráfico". Esta

análise é feita troço a troço, simultaneamente com uma repetição da simulação, sendo colocadas algumas questões para uma melhor compreensão dos conceitos que se pretendem introduzir (Fig.5).

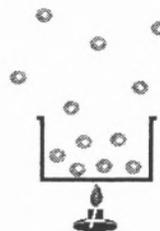
### 3.3. Utilização das aplicações na aula

Os alunos dispunham de uma ou duas aulas por módulo para em grupo estudarem os assuntos nela apresentados e responderem às questões propostas. A partir dos re-

### MUDANÇAS DE ESTADO



Analisar Gráfico



Aquecer



Fig. 4 - Reprodução do écran da aplicação com a simulação das mudanças de estado e construção do gráfico  $T = f(t)$

## MUDANÇAS DE ESTADO

Observe o gráfico com atenção e, para cada trecho, A, B, C, D e E responde às questões que te vão sendo postas.

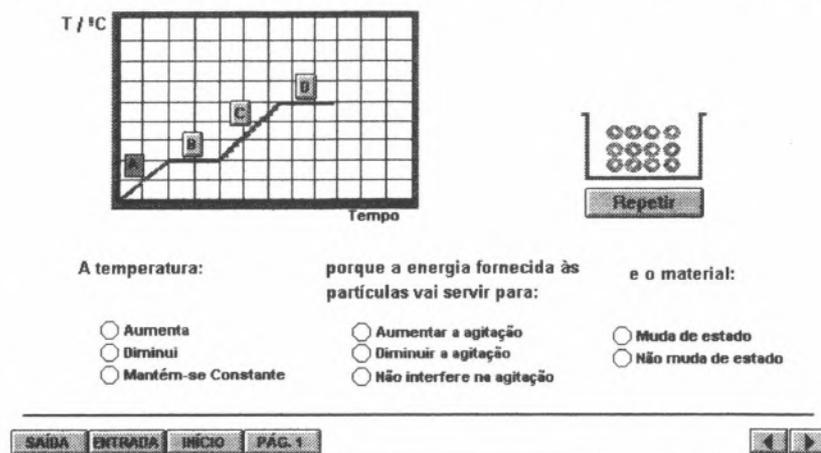


Fig. 5 - Reprodução do ecrã da aplicação com a interpretação do gráfico  $T = f(t)$  correspondente às mudanças de estado "sólido  $\rightarrow$  líquido  $\rightarrow$  gás".

gistos dos percursos seguidos e das respostas dadas, obtidos a partir da impressão em papel, procedia-se à sua discussão na turma. Sempre que necessário podiam ser revistos alguns aspectos mais importantes, recorrendo à projecção da aplicação através de uma placa de cristais.

#### 4. AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM DOS ALUNOS

De uma forma global os resultados obtidos, quer através da aplicação de um questionário quer de entrevistas realizadas a alguns alunos, três meses após ensino, parecem indicar ter havido da parte dos alunos da turma experimental relativamente aos da turma de controlo: (a) uma maior aplicação da ideia de espaços intermoleculares vazios, especialmente para os estados líquido e gasoso; (b) maior referência à existência de movimento intrínseco das moléculas; (c) maior facilidade na aplicação de ideias submicroscópicas na explicação dos fenómenos apresentados. No entanto, devido às limitações inerentes ao estudo e ao reduzido número de alunos entrevistados, não podemos tomar os resultados obtidos

para além de um simples indicador positivo a favor da hipótese de que o software hipermedia utilizado possa ser facilitador da mudança conceptual dos alunos. É, contudo, nossa convicção que uma utilização mais alargada e sistemática da aplicação produzida poderá conduzir a resultados mais significativos.

#### 5. EM JEITO DE CONCLUSÃO

A aplicação construída não pode ser entendida como uma peça de software acabada. Não passa de um protótipo em que se pretendeu criar alguns micro-mundos de aprendizagem, ligados entre si segundo uma sequência que nos pareceu lógica, lançando ideias que, na sua materialização, perderam grande parte do "poder" com que tinham sido concebidas. E, se outro mérito não tem, poderá contudo ser a semente para quem, agarrando a ideia inicial, a queira completar, ou fragmentar em pequenos micro-mundos a serem utilizados em momentos específicos de uma estratégia de ensino enquadrada numa perspectiva construtivista da aprendizagem.

1 Esc. Secundária da Maia  
 2 Universidade do Minho

#### REFERÊNCIAS

- A. Brook, H. Briggs, R. Driver (Editores), *Aspects of secondary students' understanding of the particulate nature of matter*, Children's Learning in Science Project, University of Leeds, 1984.
- A. Gomes, A. Oliveira, D. Pereira, *Análise Psicológica* 1 (1990) 25-35.
- B. Andersson, *Studies in Science Education* 18 (1990) 53-85.
- D. Jonassen, *Educational Technology* 35 (1995) 60-63.
- D. Tolhurst, *Educational Technology* 35 (1995) 21-26.
- J. Nussbaum, R. Driver, E. Guesne, A. Tiberghien (Editores), *Children's ideas and the learning of science*, Milton Keynes, London, 1985.
- L. Renstrom, J. Novak (Editor), *Proceedings of the 2nd International Seminar "Misconceptions and Educational Strategies in Science and Mathematics"*, Cornell University, 1987.
- M. Barboux, A. Chomat, C. Larcher, M. Méheut (Editores), *Modèle particulaire et activités de modélisation en classe de 4ème*, L.I.R.E.S.P.T., Paris, 1987.
- R. Branson, *Educational Technology* 30 (1990) 7-10.
- R. Driver, E. Guesne, A. Tiberghien (Editores), *Children's ideas and the learning of science*, Milton Keynes, London, 1985.
- R. Osborne, P. Freyberg (Editores), *Learning in science: The implications of children's science*, Heinemann, 1985.
- C. Clavel, *Utilização de software hipermedia no ensino da Química*, Universidade do Minho, Dissertação de Mestrado (não publicada), 1996.

## Os alunos vêm cada vez mais mal preparados...

“..tenho encontrado bastantes dificuldades provenientes da má preparação dos meus alunos. Os exames na nossa instrução secundária são sempre muito fáceis; facilitamos mesmo na maior parte do grande número dos nossos liceus de província. E pelo que respeita aos exames de Princípios de Física e Química e História Natural, é preciso que o professor dos cursos superiores não conte absolutamente nada com os conhecimentos que os seus discípulos deveriam ter das matérias dos respectivos programas. O ensino não tem a feição experimental que deveria ter; os estudantes aprendem de cor os seus compêndios, e passado pouco tempo têm esquecido tudo. Isto é ainda mais verdade da química liceal. Tem-me sucedido muitas vezes falar nas minhas explicações de fenó-

menos vulgares observados em corpos vulgares, e reconheci que a maioria dos meus discípulos os ignoram. Quando sabem que existe o amoníaco e o ácido clorídrico, é vulgar que ignorem que se trata de dois corpos gasosos muito solúveis em água.

Desta falta de conhecimentos preparatórios é que resultam as dificuldades que eu tenho encontrado na exposição da química filosófica, e que igualmente creio têm encontrado outros professores de química em escolas superiores. Há de certo excepções; há alguns bons professores de introdução nos liceus; há alguns estudantes que mesmo com maus professores se apresentam regularmente preparados, mas são excepções muito honrosas que mais servem para confirmar a regra geral.”

*F. Sousa Gomes,  
Nota sobre o ensino da Química  
na Universidade de Coimbra, 1892.*

# O Método dos Vapores Metálicos

JOÃO LUÍS A. FERREIRA DA SILVA\*

## 1 - INTRODUÇÃO

Um dos processos mais recentes para aumentar a reactividade de metais com substratos orgânicos, de forma a permitir a obtenção de melhores rendimentos, é o Método dos Vapores Metálicos (Metal Vapour Synthesis - MVS). Este método consiste em vaporizar metal em vácuo e co-condensá-lo com o vapor do substrato na superfície arrefecida do vaso reaccional (Figura 1). A difusão e a reacção dos átomos metálicos assim formados com as moléculas orgânicas, durante o aquecimento do vaso reaccional até à temperatura ambiente, produz a formação de novas espécies, geralmente complexos organometálicos.

Esta técnica principiou a ser utilizada em 1969 por Timms, que preparou os complexos  $[\text{Cr}(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)_2]$ , bis(benzeno)crómio (Equação 1), e  $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$ , ferroceno, por co-condensação dos vapores dos respectivos metais com benzeno ou ciclo-pentadieno [1].

Estes complexos já tinham anteriormente sido sintetizados por métodos convencionais.

O número actual de reacções efectuadas por MVS é já bastante grande. Esta técnica e as suas aplicações são discutidas em dois livros [2,3] e também em vários artigos de revisão [4 - 10].

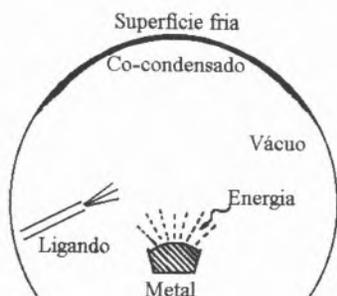
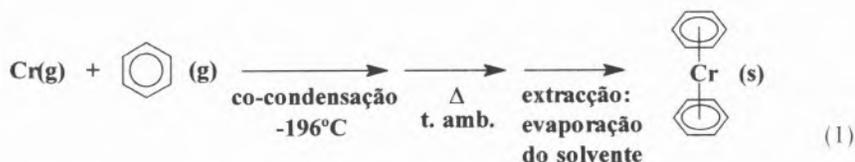


Fig. 1 - Descrição esquemática do Método dos Vapores Metálicos



## 2 - EQUIPAMENTO

O Método dos Vapores Metálicos necessita de equipamentos relativamente complexos, que permitam a evaporação simultânea de metais (com temperaturas de vaporização que vão desde 153°C para o Césio, até 3309°C para o Tungsténio) e de ligandos orgânicos, bem como a sua co-condensação a baixas temperatu-

dois andares e elevado caudal e por uma bomba de alto vácuo; os primeiros reactores utilizavam bombas difusoras mas os mais recentes recorrem a criobombas ou bombas turbomoleculares, que têm a vantagem de não contaminar o sistema com óleo [11].

A superfície reaccional é, em geral, a superfície interna do reactor. A superfície exterior do balão é arre-

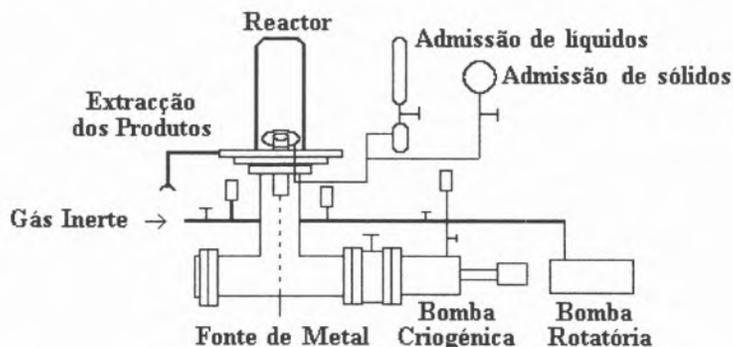


Fig. 2 - Equipamento para MVS

res e o seu isolamento em atmosfera inerte (uma vez que a grande maioria dos produtos formados são instáveis ao oxigénio do ar).

Os componentes fundamentais de um equipamento de vapores metálicos são a superfície reaccional (ou reactor), a fonte de átomos metálicos, os sistemas de admissão de substrato e de extracção de produtos, e o sistema de vácuo (Figura 2).

O sistema de vácuo destina-se a criar no interior do reactor uma pressão suficientemente baixa para garantir que o livre percurso médio de colisão dos átomos e das moléculas de substrato é superior ao raio do reactor, assegurando, assim, que não se dão reacções secundárias enquanto as espécies se encontram a caminho da superfície reaccional. É constituído por uma bomba rotatória de

fecida, quase sempre com azoto líquido, para promover a co-condensação do metal e do ligando. Os reactores mais utilizados são balões de vidro (ou metal), cilíndricos ou esféricos.

Os balões cilíndricos constituem os reactores estáticos e a evaporação do metal e do ligando dá-se no centro do reactor, de um modo radial [2,8] (Figura 3).

Os balões esféricos são utilizados nos reactores rotativos, em que o balão se encontra animado de um movimento de rotação, sendo o metal e o ligando evaporados em direcções diametralmente opostas (Figura 4). A principal vantagem da utilização deste tipo de reactores reside no facto de eles tornarem praticamente impossível a interacção dos átomos do metal com as moléculas

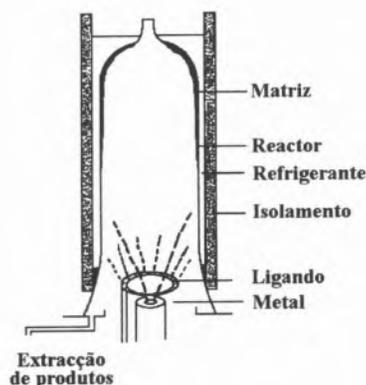


Fig. 3 - Reactor estático

do ligando ao longo do trajecto até às paredes do reactor, onde co-condensam e reagem devido à rotação do balão. Contudo, apresentam como desvantagem a facilidade com que se desenvolvem fugas no selo rotatório de vácuo.

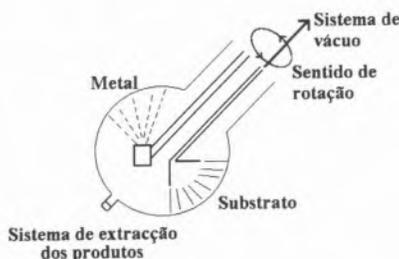


Fig. 4 - Reactor rotatório

Os reactores rotatórios podem igualmente ser utilizados para efectuar reacções entre átomos metálicos e soluções de ligandos pouco voláteis em solventes inertes, como o isopentano ou o metilciclohexano [2,4]. Neste caso, grande parte da solução mantém-se no fundo do reactor. No entanto, como resultado da rotação (a uma velocidade 60-100 rpm), cria-se um filme de solução na parte superior do reactor, onde o vapor metálico está a ser depositado. A reacção dá-se entre este filme de solução e o vapor metálico.

O sistema de admissão de ligando varia segundo o tipo de ligandos que se pretende introduzir no reac-

tor. Para ligandos líquidos consiste num sistema de ampolas colocado acima do nível do reactor, que conduz o ligando por gravidade até à câmara em que é vaporizado. No caso de ligandos sólidos sublimáveis resume-se a um balão aquecido por uma manta. Em ambos os casos a entrada no reactor é feita por um sistema de tubuladuras, aquecido para evitar a condensação do ligando, e controlado por válvulas micrométricas. O dispositivo de dispersão do ligando na superfície do reactor pode ser um anel ou um cone, consoante a geometria do reactor (ver Figuras 3 e 4).

Os principais tipos de fontes utilizados são o canhão de electrões e as fornalhas de resistência de molibdénio ou tungsténio revestidas a alumina, podendo também utilizar-se lasers ou filamentos aquecidos [2].

Com fornalhas de alumina (Figura 5) é possível evaporar Mg, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Ag, Zn, Cd e Al [2] em quantidades até 50 g/hora. Neste caso o metal mais electropositivo que se consegue evaporar é o crómio, visto que, com o aumento de carácter electropositivo aumenta também o ataque químico à alumina.

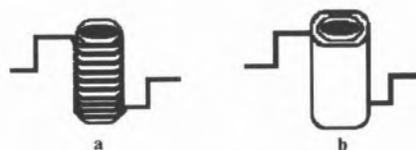


Fig. 5 - a) Enrolamento de tungsténio em torno de um cadinho; b) Cadinho revestido com alumina

Foi com um reactor estático equipado com uma fornalha constituída por um cadinho de alumina, envolvido por um enrolamento de fio de tungsténio e arrefecido a água (Figura 6) que Timms, tal como acima referido, efectuou a síntese do bis(benzeno)crómio a partir da co-condensação de benzeno e vapor de crómio [1]. Este reactor encontra-se comercializado pela Kontes-Martin Glass Company [12] e destina-se não só à pesquisa como também, pela sua facilidade de utilização, à execução de trabalhos de laboratório de estu-

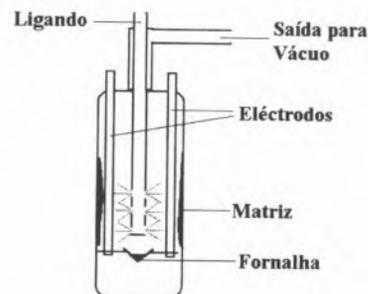


Fig. 6 - Reactor estático com fornalha

dantes de licenciatura, tendo sido utilizado por alunos da Universidade de Bristol com bons resultados [13].

O método mais conveniente para alargar o espectro de metais evaporáveis, bem como aumentar a sua velocidade de evaporação, é a utilização de um canhão de electrões. Este dispositivo permite vaporizar mesmo os metais mais refractários, como foi demonstrado por Green com a síntese dos bis-arenos de molibdénio [8], a partir do metal e de benzeno, tolueno e mesitileno.

Os electrões são obtidos por aquecimento de um filamento de tungsténio através da passagem de uma corrente eléctrica, e acelerados para um núcleo central de cobre pelo estabelecimento de uma diferença de potencial elevada (entre 3 e 10 kV) entre esse núcleo, que se encontra a um potencial positivo, e os restantes elementos do canhão. O núcleo é arrefecido a água e, no seu topo, encontra-se o metal a evaporar; o choque dos electrões com a superfície do metal aquece-a, vaporizando o metal. Os átomos metálicos passam para a câmara da reacção através de um orifício no escudo reflector, que foca os electrões no metal (Figura 7).

Utilizando um canhão deste tipo, com uma fonte de tensão de 10 kW, é possível evaporar Nb, Ta, Zr, Os e Re, bem como sintetizar 20g/dia de bis(tolueno)titânio ou 5 g/dia de bis-arenos de tungsténio [2]. Torna-se assim possível obter produtos em quantidades suficientes para efectuar estudos detalhados sobre as suas reactividades.

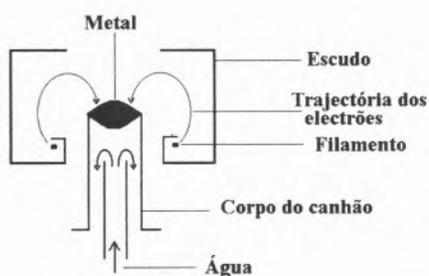


Fig. 7 - Canhão de electrões

A obtenção de um bom vácuo é particularmente importante para quem utilize como fonte de átomos metálicos um canhão de electrões, porque neste dispositivo ocorrem descargas eléctricas de alta tensão entre os seus componentes a diferentes potenciais, sempre que a pressão é superior a  $5 \times 10^{-5}$  mbar.

### 3 - DESCRIÇÃO DO MÉTODO EXPERIMENTAL

Uma reacção típica de MVS principia pela montagem do reactor com o metal e o ligando colocados nas respectivas fontes, seguida da evacuação do aparelho. Após atingida a pressão pretendida, o reactor é arrefecido com azoto líquido. Ao atingir uma temperatura suficientemente baixa para condensar o ligando principia-se a evaporação simultânea do metal e do ligando. Quando se pretende dar por concluída a reacção interrompe-se a evaporação, isola-se o reactor, que se enche com um gás inerte, e desliga-se o sistema de vácuo. Deixa-se a superfície do reactor atingir a temperatura ambiente, período durante o qual os átomos de metal e as moléculas de ligando irão reagir sobre a superfície interna do reactor. O produto obtido é extraído por gravidade, com o recurso a um solvente de lavagem, seguindo-se a sua purificação. Todas as operações a partir da extracção recorrem a técnicas de trabalho em atmosferas inertes (azoto, argon, etc), quer em linhas de vácuo, quer em caixas de luvas [14,15].

### 4 - VANTAGENS DO MÉTODO DOS VAPORES METÁLICOS

As vantagens do método dos vapores metálicos sobre os processos de síntese convencional são de dois tipos:

#### 4.1 - Vantagens termodinâmicas e cinéticas:

Como já foi referido este método permite obter por uma reacção num só passo produtos que por outras vias são obtidos em rendimentos muito reduzidos, ou mesmo impossíveis, de sintetizar. Por exemplo, o MVS é a única via possível para a síntese dos bis-naftalenos de Ti, V, Cr e Mo[2]. Noutros casos, como para o bis(benzeno)tungsténio, o rendimento obtido (40%) é muito superior ao conseguido pelo processo Fischer-Hafner, através da redução de sais com alumínio (2%), reduzindo-se igualmente o tempo de preparação de cerca de 2 a 3 semanas de trabalho para 2 dias. A razão para estes melhoramentos prendem-se com as vantagens cinéticas e termodinâmicas do método, ilustradas na Figura 8.

Embora o diagrama representado nesta figura seja qualitativo e simplificado é possível ver que cine-

ticamente a reacção nas condições de MVS



é mais favorável uma vez que a sua energia de Gibbs de activação,  $\Delta G^\ddagger(\text{mvs})$ , é menor do que a correspondente energia para a reacção em solução,  $\Delta G^\ddagger(\text{sol.})$ , partindo do metal no estado sólido.



Este facto é facilmente explicável com base na fácil coordenação dos ligandos ao átomo isolado para formarem o estado de transição. Por outro lado a reacção na fase gasosa é igualmente favorecida termodinamicamente uma vez que o valor de  $\Delta_r G(\text{mvs})$  é maior em valor absoluto do que o de  $\Delta_r G(\text{sol.})$ . Em ambos os casos as diferenças registadas são aproximadamente iguais ao  $\Delta_{\text{sub}} G$  do metal. Quanto maior a energia de Gibbs de sublimação do metal, maior vantagem se obtém por utilização de MVS. Para o tungsténio, por exemplo,  $\Delta_{\text{sub}} G_m^\circ = 807.3 \text{ kJ/mol}$  [16].

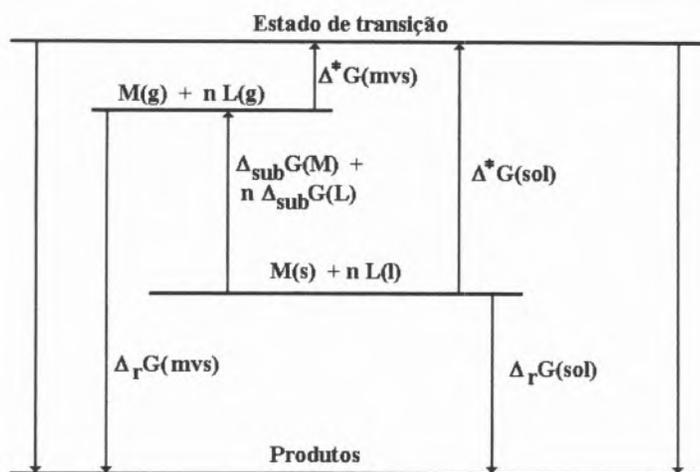


Fig. 8 - Comparação energética entre MVS e processos convencionais

#### 4.2 - Vantagens técnicas

Enquanto que as reacções em solução ocorrem muitas vezes em vários passos, exigindo operações de transferência e purificação intermédias, as reacções por MVS dão-se num só passo, o que as torna mais simples de executar.

Os produtos formados estão sujeitos a controle termodinâmico, formando-se apenas o mais estável. Este facto, aliado a que a maior parte dos metais vaporizam sob a forma de átomos e não de agregados poliatômicos e se encontram no estado fundamental (uma vez que os estados excitados têm tempos de vida muito curtos) faz com que geralmente de cada reacção resulte apenas um produto. Esta regra apresenta como grandes excepções

A natureza monoatômica do vapor metálico permite ainda eliminar completamente alguns problemas encontrados com as reacções com metais no estado sólido, como a baixa superfície de contacto e também a existência de óxidos à superfície do metal.

A utilização de baixas temperaturas (geralmente 77K) para condensar os vapores do metal e do ligando facilita igualmente o isolamento de complexos termicamente instáveis.

#### 5 - POSSÍVEIS REACÇÕES ENTRE ÁTOMOS METÁLICOS E SUBSTRATOS

As principais reacções que podem ocorrer na co-condensação

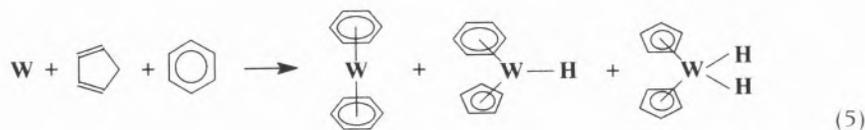
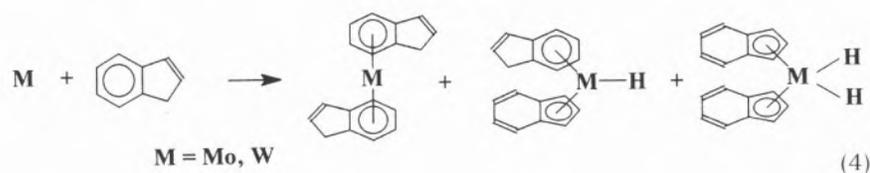
A coordenação simples dá-se quando o ligando se coordena ao metal sem que haja alteração no seu estado de oxidação.

Os exemplos mais conhecidos deste tipo de reacção são a preparação de bis-arenos de metais de transição (Equação 6) e a reacção de átomos metálicos com fosfinas (Equação 7) [2].

Na adição oxidativa a coordenação do ligando dá-se com aumento do estado de oxidação do metal.

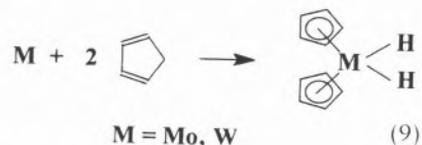
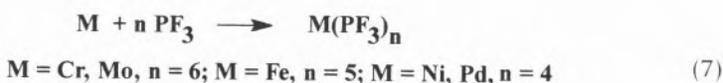
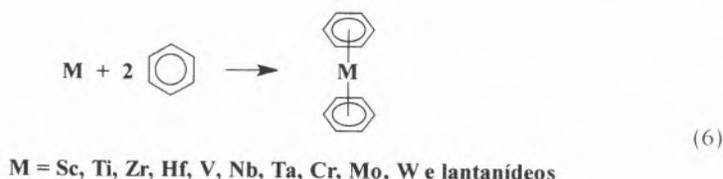


Para tal, é necessário que o átomo metálico disponha de, pelo menos, duas posições de coordenação livres e de electrões *d* não ligantes, condições estas que, como é fácil de ver, são inteiramente obedecidas por átomos isolados de metais de transição. São exemplo deste tipo as reacções de Mo e W com ciclopentadieno (Equação 9) e as reacções entre átomos de metais de transição e halogenetos orgânicos (Equação 8, R=radical orgânico, p.ex. alquilo, X=halogeneto) [2].



os casos da possibilidade de obtenção de isómeros com estabilidades semelhantes (Equação 4) ou da utilização de misturas de ligandos (Equação 5) [2].

de um átomo de metal de transição e moléculas de substratos orgânicos são a adição ou coordenação simples, a adição oxidativa e reacções redox ou de transferência de electrões.



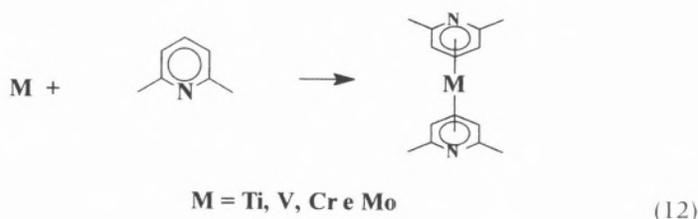
Uma aplicação muito importante deste tipo de reacções é a síntese de Reagentes de Grignard (Equação 10), com rendimentos muito superiores aos obtidos por síntese convencional, envolvendo magnésio activado [2].



Nas reacções redox (Equação 11) há transferência de electrões do metal para o ligando.



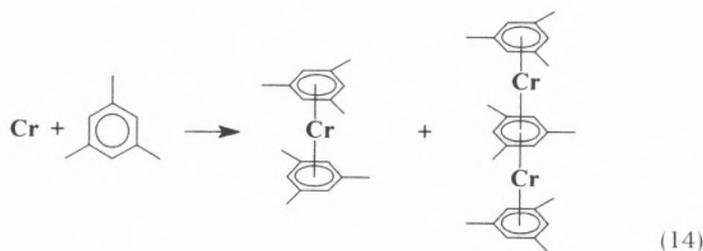
Como exemplo desta reacção tem-se a formação de  $[M^{3+}(t\text{-BuDAB})_3]$  a partir de átomos de Ti, Y, Nd, Sm e Yb e t-BuDAB (t-butildiazabutadieno = t-Bu-N=CH-CH=N-t-Bu, ligando bidentado, que se coordena pelos dois átomos de azoto) [9].



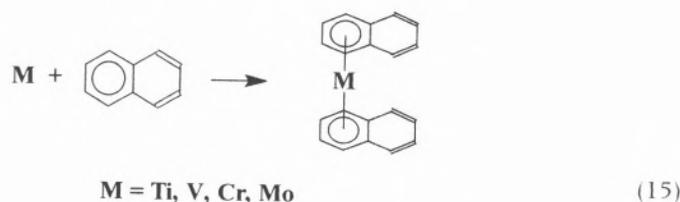
## 6 - APLICAÇÕES DO MÉTODO DOS VAPORES METÁLICOS

### 6.1 - Síntese de complexos organometálicos

Embora já tenham sido citados bastantes exemplos de sínteses de complexos organometálicos por MVS, será ainda conveniente referir alguns outros, como a síntese de complexos com heterociclos (Equação 12) [2], a síntese de bis(benzotiofenos), complexos estes que podem ser utilizados como modelos para estudos de desulfuração do petróleo (Equação 13), e a síntese de complexos sanduiche com dois átomos metálicos e três anéis benzénicos (Equação 14) [10].



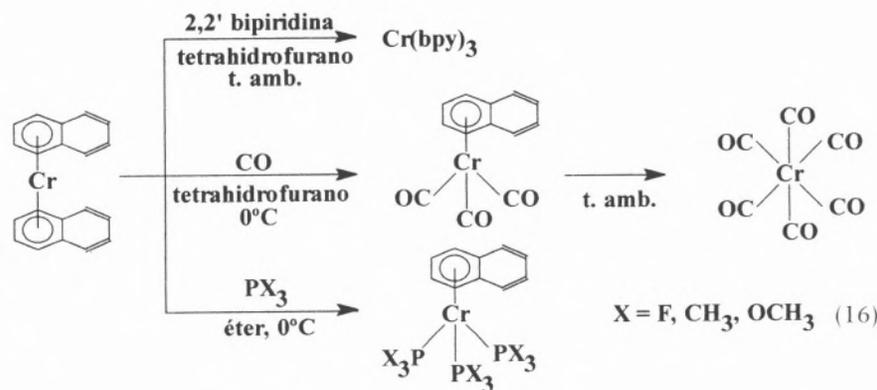
Um caso particular deste tipo de aplicação é a preparação de compostos de partida para a síntese de novos complexos organometálicos; como exemplo principal deste tipo de utilização pode citar-se a síntese dos bis(naftalenos) de Ti, V, Cr e Mo, já referida na introdução (Equação 15). Estes compostos só podem ser obtidos através de MVS, uma vez que a aplicação do método de Fischer-Hafner ao naftaleno resulta na sua parcial hidrogenação [2].



Os bis(naftalenos) de Ti, V, Cr e Mo constituem excelentes compostos de partida para reacções de substituição, em especial na preparação de complexos mononaftalénicos (Equação 16).

### 6.2 - Preparação de "lamas" reactivas de metais de transição

O Método dos Vapores Metálicos pode ser utilizado para produzir metal, finamente dividido, numa forma particularmente activa. A co-condensação de átomos metálicos com solventes "inertes" conduz à for-



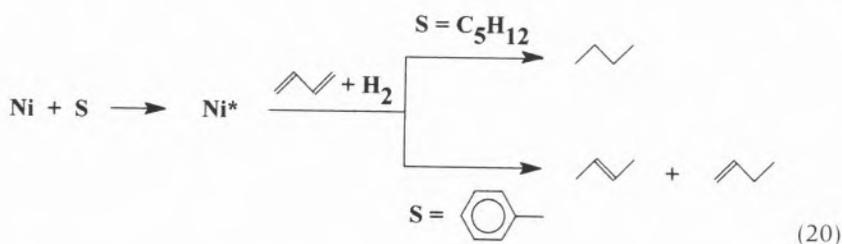
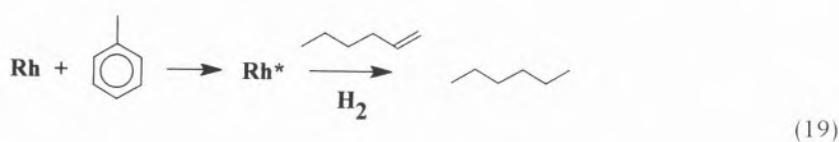
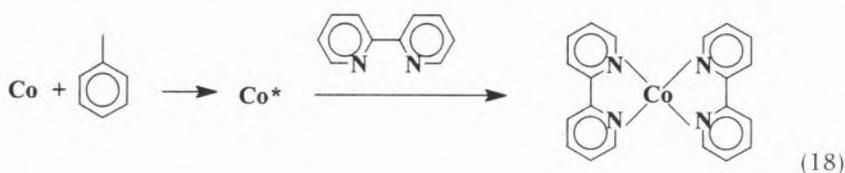
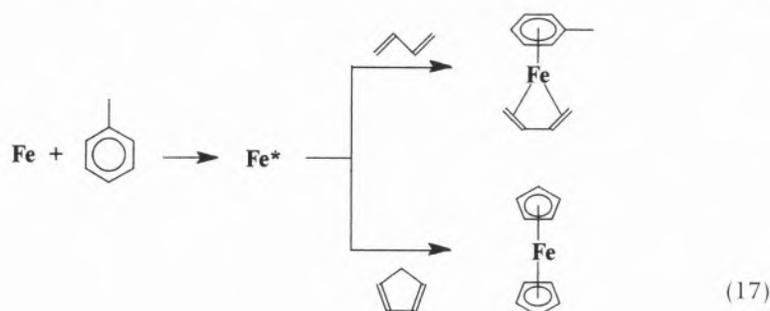
mação de cristalites metálicas,  $M^*$ , de pequenas dimensões que, ao sofrerem pirólise, hidrogenação ou hidrólise, libertam hidrocarbonetos com um número de átomos de carbono inferior ao do solvente inicial [3].

Este facto indica que na sua formação esteve envolvida a ruptura de ligações C-C, formando-se fragmentos de solvente que se coordenam aos

com alcanos, também é possível obter estas suspensões por co-condensação de arenos ou tetrahidrofurano com metais com os quais não formem complexos estáveis em proporções estequiométricas, como o Fe, Co ou Ni.

As "lamas" assim produzidas podem ser utilizadas na preparação de complexos organometálicos (Equação 17), alguns dos quais ape-

por átomos isolados, com todas as posições de coordenação livres, logo bastante reactivos, deverá ser um bom catalisador para um grande número de reacções. De entre os ensaios catalíticos efectuados por este método merecem particular referência estudos da oligomerização de butadieno (Equação 21), da isomerização de olefinas (Equação 22) e de polimerização de estireno (Equação 23) [2].



átomos metálicos, reduzindo a formação de ligações metal-metal. Este reduzido grau de ligação metal-metal vai-se reflectir na elevada área superficial apresentada pelas cristalites e na grande reactividade destas suspensões metálicas ou "lamas".

Apesar de serem mais comuns as "lamas" obtidas por co-condensação

nas sintetizáveis por esta via (Equação 18) ou, ainda, como catalisadores (Equações 19 e 20).

### 6.3 - Estudos de catálise com vapores de metais de transição

Devido à sua natureza o vapor de um metal de transição, composto

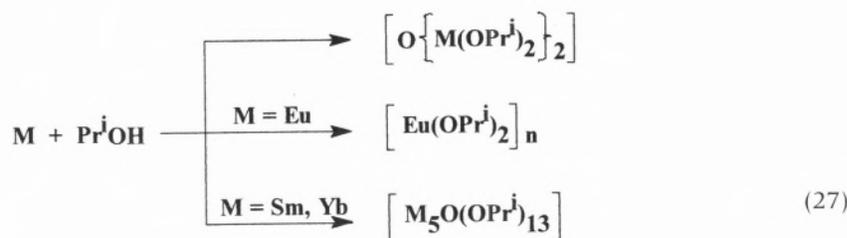
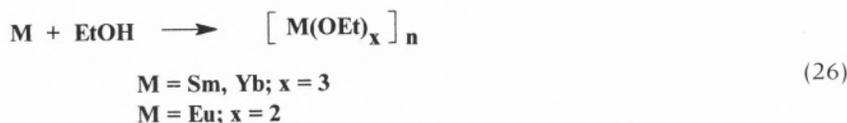
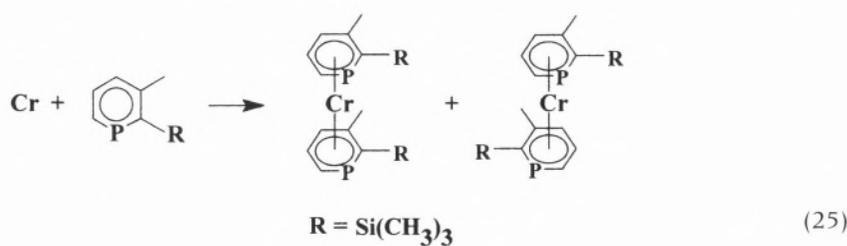
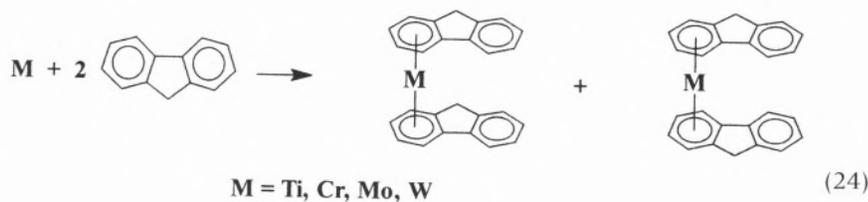
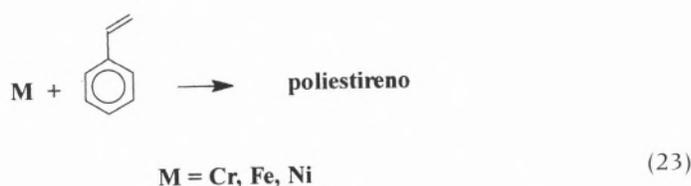
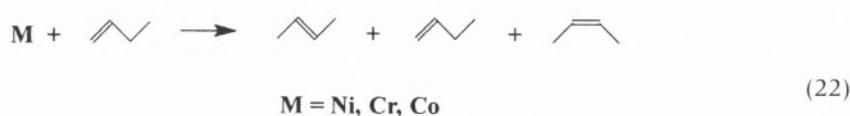
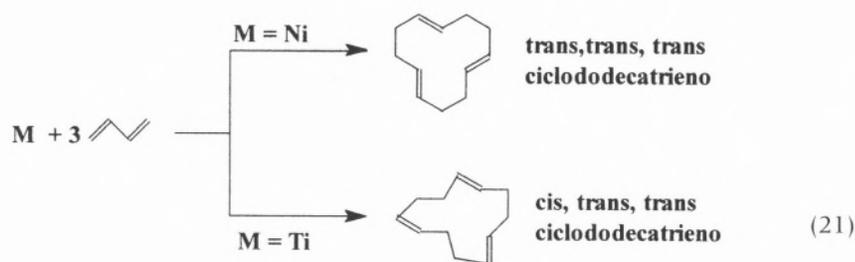
## 7 - O MÉTODO DOS VAPORES METÁLICOS EM PORTUGAL

Actualmente em Portugal dois grupos de investigação utilizam o Método dos Vapores Metálicos.

O primeiro a utilizar este método foi o grupo de Química Organometálica do Centro de Química Estrutural (CQE), do Instituto Superior Técnico, que, nos anos 70, adquiriu o reactor VSP-101, o primeiro reactor para MVS comercializado pela firma GV Planer Ltd.. Este reactor, do tipo rotatório, foi utilizado na preparação de catalisadores de  $\text{TiCl}_4$  e  $\text{MgCl}_2$  e na obtenção de "lamas" de magnésio. Contudo, mostrou-se bastante ineficiente, em particular no que diz respeito ao vácuo, e foi substituído por um reactor estático construído no CQE, que reteve do reactor anterior apenas o gerador de alta-tensão, e que utiliza como bomba secundária uma criobomba em lugar de uma difusora.

Com este reactor foram, até ao momento, efectuados estudos de reactividade de vapores metálicos com tiofenos, nomeadamente da sua desulfuração, e a síntese de alguns complexos organometálicos com ligandos policíclicos (Equação 24) e heterocíclicos (Equação 25) [17]:

O outro grupo de investigação que utiliza este método pertence ao Departamento de Química do Instituto de Tecnologia Nuclear, que adquiriu também à firma G.V. Planers Ltd. um reactor VSP 500, um dos modelos mais recentes, equipado com um canhão de electrões (com uma potência de 7 kW) e uma fornalha de resistência (com uma potência de 2.4 kW).



As pesquisas efectuadas por este grupo incidem, principalmente, no estudo das reacções de vapores de lantanídeos com alcoóis (Equações 26 e 27), como via alternativa para a preparação de alcóxidos destes metais por métodos em solução [18].

\* Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1096 Lisboa Codex.

**BIBLIOGRAFIA**

1. P.L. Timms, *J. Chem. Soc., Chem. Comm.* (1969), 1033.
2. J.R. Blackborrow, D. Young, *Metal Vapour Synthesis in Organometallic Chemistry*, Verlag, New York, 1979.
3. K.J. Klabunde, *Chemistry of Free Atoms and Particles*, Academic Press, New York, 1980.
4. P.L. Timms, *Cryochemistry*, eds. M. Moskovits, G.A. Ozin, capítulo 3, Wiley, New York, 1976.
5. M.J. McGlinchey, P.S. Skell, *Cryochemistry*, eds. M. Moskovits, G.A. Ozin, capítulo 5, Wiley, New York, 1976.
6. P.L. Timms, T.W. Turney, *Adv. Organomet. Chem.*, **15** (1977), 53.
7. U. Zenneck, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **29** (1990), 126.
8. M.L.H. Green, *J. Organomet. Chem.*, **200** (1980), 119.
9. F.G.N. Cloke, *Chem. Soc. Rev.* (1993), 17.
10. E. Schimdt, K.J. Klabunde, *Encyclopedia of Inorganic Chemistry*, eds. R. B. King, Vol. 4, 2196, John Wiley, Sussex, 1994.
11. A.M.C. Moutinho, M.E.S. Silva, M. Áurea Cunha, *Tecnologia de Vácuo*, Universidade Nova de Lisboa, 1980.
12. *Metal Atom Reactor* (Catálogo de reactor de vapores metálicos), Kontes Martin & Co, 1975.
13. P.L. Timms, *J. Chem. Ed.*, **49** (1972), 782.
14. A.J.L. Pombeiro, *Técnicas e Operações Unitárias em Química Laboratorial*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1983.
15. J.P. Leal, *Química*, **59** (1995), 56.
16. *The NBS Tables of Chemical Thermodynamics Properties*, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **11** (1982), Supplement nº 2.
17. F.G.N. Cloke, A.R. Dias, A.M. Galvão, J.L. Ferreira da Silva, *J. Organomet. Chem.*, em publicação.
18. J. Carretas, A. Pires de Matos, *Mat. Chem. and Phys.*, **31** (1992), 123.

## Argilas, as Essências da Terra

Aécio Pereira Chagas

Colecção Polémica, Editora Moderna, São Paulo, Brasil, 1996 (2ª edição)

ISBN 85-16-01504-1. Distribuído em Portugal pela Dinalivro. Preço: 1470\$00.

“Uma parte importante da Natureza à qual não costumamos dar muita atenção é o *solo*, a terra que pisamos”. É este o ponto de partida que Aécio Pereira Chagas escolheu para iniciar o leitor - químico e não-químico - numa área interessante do ponto de vista científico e com um enorme impacto tecnológico e social. *Argilas, as Essências da Terra* é uma obra que se lê com prazer, de um só fôlego (apenas 53 páginas), e que serve para aprender ou recordar alguns assuntos que devem seguramente fazer parte da nossa cultura geral. Depois de uma explicação sumária, mas clara, das características das argilas, o autor aborda o tema da natureza do solo, da sua constituição, bem como a

relação destas com a fertilidade. Porque é que na areia (sílica) há quase total ausência de vegetação? Qual o papel das “queimadas” e da “calagem” do solo? Num terceiro capítulo descrevem-se as técnicas de fabrico de objectos cerâmicos, do cimento e do vidro, e discute-se a natureza reciclável de alguns desses materiais. Segue-se uma narrativa sobre aplicações de argilas em áreas de maior tecnologia — as argilas como adsorventes, como “cargas” (excipientes), como catalizadores. Explica-se sumariamente o que são zeólitos e argilas “pilarizadas”, substâncias com uma importância industrial crescente. Abro aqui um parêntesis para referir que a designação em Português europeu des-

tes últimos materiais é “argilas com pilares”.

Creio que *Argilas, as Essências da Terra* é a segunda monografia escrita por Aécio Pereira Chagas. Da primeira (*Como se Faz Química*, Editora da Unicamp, Campinas, 1989) dei conta nas páginas deste *Boletim* (nº 39, pág. 69, 1990). Em ambas transparece a grande capacidade de comunicação do autor, bem como o seu prazer em ensinar e em divulgar Química.

José Artur Martinho Simões  
Departamento de Química e Bioquímica  
Faculdade de Ciências da Universidade  
de Lisboa

## Livro adquirido para a Biblioteca

A. A. do Souto, J. Pinto de Azevedo, M. R. da Silva Pinto, A. J. Ferreira da Silva, “Relation Médico-Légale de l'affaire Urbino de Freitas”, Porto, 1893.

## A. HANNA



### A1. HI96250 Medidor de pH para profissionais

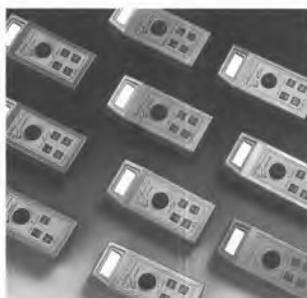
O novo medidor de pH HI96250 é na realidade um instrumento para verdadeiros profissionais. Concebido para trabalhar em condições ambientais e industriais bastante desfavoráveis, este novo modelo cumpre com as "GLP" e garante a obtenção de resultados com elevada precisão. Como opção existe a possibilidade de ligação a PC através do software HI92000 compatível com o Windows. O HI96250 obedece às normas IP67 garantindo uma total protecção quando imerso em água ou quando colocado em ambientes com pós em suspensão.



### A2. HI93703 — Uma Maneira Simples e Precisa de Medir Turvação

O HI93703 é um turbidímetro portátil com precisão laboratorial desenvolvido pela HANNA INSTRUMENTS e ideal para medições de turvação quer em laboratório quer no campo e em várias aplicações, tais como: condicionamento e tratamento de águas, sistemas de aquecimento, produção de lacticínios, produção de bebidas, indústrias têxteis e de papel e muitas outras. O HI93703 está em conformidade com as directivas ISO7027, que asseguram uma longa duração de vida ao instrumento e excelente qualidade nos resultados mesmo em amostras coloradas ou de baixa turvação. Este turbidímetro possui 4 teclas e pesa apenas 510 grms, medindo turvação de 0 a 1000 FTU numa questão de segundos. Para melhores resultados no campo, o instrumento mede de 0 a 50 FTU com resolução centesimal. O instrumento possui ainda um relógio incorporado que permite ao utilizador verificar os dados

da última calibração (incluindo data e hora). Esta importante característica garante um bom desempenho e preenche os requisitos "GLP". Além desta característica o HI93703 possui ainda mostrador de duplo nível com mensagem de auto diagnóstico, calibração automática em dois pontos a 0 e a 10 FTU, corpo à prova de derrames, funcionamento a pilhas com capacidade de efectuar até 1000 medições e tampa que previne a entrada de luz externa evitando interferência com a amostra. Este instrumento no que diz respeito a interferências electromagnéticas encontra-se em conformidade com as Directivas CE.



### A3. Novos medidores de iões específicos

Surgiu recentemente no mercado outra novidade desenvolvida pela HANNA Instruments, novos medidores de iões específicos que asseguram medições rápidas e precisas dos parâmetros das análises da água. Agora a HANNA coloca ao seu dispor mais de 40 medidores simples e de multiparâmetros para testar, literalmente de A a Z, a presença de químicos ou metais. Os mais recentes membros desta família, ainda em crescimento, são os seguintes:

- HI93740: Medidor de Níquel de baixa gama
- HI93741: Medidor de Dureza Total e Ferro
- HI93743: Medidor de Ferro e pH
- HI93744: Medidor de Dureza Total, Ferro e pH



### A4. HANNA : Analisadores de Cloro para controlo de processos

#### Monitorização de Cloro

O cloro é o desinfectante de água mais utilizado nas aplicações de tratamento de água potável e de águas residuais, até piscinas e sanitização de balneários. O cloro presente na água

impõe-se às bactérias, ficando apenas uma parte da quantidade original (cloro livre) para continuar a função de desinfectante. A monitorização do nível do cloro desempenha um papel fundamental na saúde pública, nomeadamente em aplicações como tratamento de água potável e retorno do investimento e eficiência para sistemas de aquecimento e indústria. Por isso, demasiado cloro gerará um odor e sabor desagradáveis ou pode mesmo tornar-se nocivo, enquanto que uma reduzida quantidade pode ser de todo ineficaz.

A Hanna Instruments, completa agora a sua gama de Medidores Portáteis de Cloro, oferecendo os Analisadores/Controladores de Cloro PCA300 e PCA301. Estes instrumentos com micro-processor, podem monitorizar de forma contínua uma amostra do teor de Cloro Total ou de Cloro Livre numa gama de 0 a 5 mg/L e com resolução de 0.01. O princípio de operação baseia-se numa adaptação do método DPD 330.5 de recomendação EPA.

#### Método de Análise

No método Colorimétrico DPD, os indicadores N, N-diethyl-p-fenilendiamina e um auxiliar (buffer) são misturados com a amostra. O cloro livre disponível oxida o reagente de indicador DPD num pH situado entre 6.3 e 6.6 para formar um composto de cor magenta. A intensidade da cor resultante é proporcional à concentração de cloro na amostra. A finalidade da solução padrão é manter o pH apropriado. No modelo PCA301, medidor de Cloro Total e cloraminas combinadas é acrescentado iodo de potássio. As cloraminas da amostra fazem com que os iões iodetos se tornem em iodo que reage com o Cloro livre para oxidar o indicador DPD. Para esta operação, é necessário um pH de 5.1. Assim, as medições de Cloro Total disponível requerem uma solução padrão diferente, contendo iodo de potássio. Logo que a reacção química esteja completa, o sinal óptico de 555nm é comparado com o sinal medido através da amostra, antes de os reagentes serem acrescentados. A partir destas medições é calculada a concentração de Cloro e visualizada num mostrador LED de 4 dígitos.

#### Fonte de Luz LED

O PCA300 e o PCA301 são os primeiros analisadores de cloro equipados com LED como fonte de luz. Ao contrário das lâmpadas standard, o LED verde tem uma longa duração e mantém uma emissão mais estável durante toda a vida do instrumento. Os seus picos de corrente de 555nm asseguram máxima absorção das amostras processadas.



### A5. A Nova Cor dos Agitadores Magnéticos HANNA

Sendo uma empresa certificada ISO 9001, a Hanna Instruments oferece uma vasta gama de produtos manufacturados de acordo com os mais altos requisitos de qualidade. Assim foi lançada no mercado uma nova gama de agitadores magnéticos disponíveis em nove cores diferentes e especialmente desenhados para serem utilizados em laboratórios de pesquisa e controlo de qualidade. Com a nova série de agitadores HI180, compactos, leves e fáceis de manusear, o espaço na bancada deixou de ser um problema, e por serem em plástico resistente aos químicos diminuiu-se o risco de acidentes. Estes agitadores possuem controlos electrónicos que permitem ao utilizador regular a velocidade com maior precisão. Além do controlo de velocidade, estes agitadores possuem ainda o sistema exclusivo de Speedsafe™ garantindo que não seja excedida a velocidade máxima (1000 rpm).



### A6. HI9025 — Medidor de pH à Prova de Água

Ao contrário dos medidores de pH convencionais, com as soluções padrão para calibração em pH 4.01, 7.01 e 10.01, o HI9025 da Hanna Instruments permite calibração com as soluções NBS (NIST) de valores pH 6.86 e pH 9.18. Este instrumento portátil e à prova de água, desenhado para fornecer bons resultados, mesmo em condições industriais severas, mede pH/mV/°C com gama de pH de 0.00 a 14.00, e precisão de  $\pm 0.01$  pH, gama em mV de  $\pm 399.9$  (ISE) e  $\pm 1.999$  (ORP) com precisão de  $\pm 0.2$  (ISE) e  $\pm 1$  (ORP). A gama em temperatura é de 0 a 100 °C com compensação automática em toda a gama ou seleccionável sem a sonda.

## B. KONIK



### B1. Konik HRGC 4000 A, Série 20º Aniversário

O Konik HRGC 4000 A é a última geração de cromatógrafo de gases de precisão que fabricamos desde 1978. "Aperfeiçoado Modularmente" nos últimos 20 anos e baseados no conceito de "chassis normalizado", os Konik 4000 A foram desenhados para oferecer as melhores prestações do mercado e satisfazer qualquer aplicação cromatográfica.

As características principais do Konik HRGC 4000 A são:

**1. Novo Forno de Alta Resolução:** Estabilidade  $\pm 0.01^\circ\text{C}$ . Mínima Inércia Térmica. Tempo de arrefecimento rápido (de  $250^\circ\text{C}$  a  $50^\circ\text{C}$  em menos de 5 min, à temperatura ambiente).

**2. Nova Unidade de Controle de Microprocessador (Intel),** com novo ecrã de  $240 \times 180$  pontos. Menu dirigido. Visualização simultânea de todos os parâmetros, fácil de usar, etc.

**3. Gama Completa de Opções:** Programação e controle digital do fluxo e da pressão do gás portador, assim como, opcional de todos os gases detectores (EPC) e make-ups. Injectores automáticos. RS-232/RS-485. Pirólizadores. Head-space. Purga e trap. Software de controle. Automatizações multi-válvula.

**4. Total modularidade e flexibilidade:** O desenho modular genuíno de Konik, mantido durante mais de 20 anos, permite uma constante modernização do equipamento, permitindo também otimizar a configuração de qualquer /e todas as necessidades analíticas. A menor obsolescência do mercado.

**5. Versatilidade:** Todos os sistemas de injeção. Todas as opções de detecção. Todos os tipos de colunas. Qualquer tipo de controle de periféricos. Defina o seu "analisador cromatográfico" como você quiser. Fácil de configurar e reconfigurável.

**6. Baixa manutenção** devido à sua robustez e fiabilidade. Fácil de reparar pelo utilizador mediante a troca de placas e/ou módulos. Autodiagnóstico.

**7. Opção "Chaves na Mão":** Analisadores de Gases de Refinarias, Destilação Simulada, Ácidos Gordos e Analisadores de VFA, Analisadores de Água (métodos "EPA"), ...

## C. LABORTEQUE



### C1. Novo sistema para estudos Electroquímicos, RADIOMETER.

A Radiometer Analytical acrescentou a sua gama Voltalab com o novo sistema Voltalab 31. Concebido para análise electroquímica, combina a capacidade de um potenciostato  $100\text{ V} / 1\text{ A}$  com a flexibilidade do software em ambiente Windows.

As técnicas disponíveis incluem Pausa, Potencial de circuito aberto, Cronoamperometria, Cronopotenciometria, Voltamétricas, Técnicas de Impulsos, F. A. S. T. e Técnicas de Espectroscopia de Impedância Electroquímica. Para total flexibilidade estas técnicas podem ser acopladas em blocos, formando unidades de repetição.

O sistema permite ainda a compensação da queda ôhmica por feed-back positivo, com determinação automática ou manual.



### C2. Novas Centrífugas Centurion

A Centurion Scientific, introduziu nas suas centrífugas a nova tecnologia dos motores de indução, caracterizados por terem uma reduzida manutenção. Deste modo, é possível reduzir custos de manutenção, mantendo uma elevada qualidade. A gama é agora composta por centrífugas desde  $6\ 000$  a  $14\ 000\text{ rpm}$ , com rotores angulares e basculantes com capacidade para tubos desde  $0,4\text{ ml}$  a  $100\text{ ml}$ . Estão também disponíveis modelos com refrigeração desde  $-4$  a  $40^\circ\text{C}$ .

### C3. Sistema para digestões enzimáticas, Velp Científica

O sistema é composto por agitador magnético Multistirrer, tanque para água em acrílico transparente e termostato de precisão. Permite a digestão simultânea de 6 frascos de  $400\text{ ml}$ , sendo a velocidade de agitação regulável de  $50$  a  $850\text{ rpm}$ . A temperatura pode ser controlada desde a ambiente até  $60^\circ\text{C}$ .

PARA INFORMAÇÕES MAIS DETALHADAS SOBRE OS NOVOS PRODUTOS RECORTE AS FICHAS QUE LHE INTERESSAREM E ENVIE DENTRO DE UM SOBRESCRITO PARA A MORADA RESPECTIVA

### HANNA INSTRUMENTS

Árvore Industrial, lote 10, Lugar de Varziela, 4480 VILA DO CONDE  
Tels. (02) 637184 - Fax (02) 637185

Pretendo informações sobre o(s) produto(s):

- A.1
- A.2
- A.3
- A.4
- A.5
- A.6

### KONIK-TECH, S.A.

R. Prof. Barbosa Sueiro, Edifício M 1.2 - Estúdio2  
Telheiras, 1600 Lisboa; Tel. (01) 757 35 47, Fax (01) 757 34 85.

Pretendo informações sobre o(s) produto(s):

- B.1

### LABORTEQUE

Comércio de Equipamentos Laboratoriais, Lda.  
Rua das Chagas 20 1º E, 1200 Lisboa  
Tel: 01 3421758, Fax: 01 3423185  
E-mail: laborteque@mail.telepac.pt

Pretendo informações sobre o(s) produto(s):

- C.1
- C.2
- C.3

### SOQUÍMICA

Soc. de Representações de Química, Lda.  
Rua Coronel Santos Pedrosa, 15 - 1500 LISBOA  
Tel. (01) 716 51 60 - Fax (01) 7716 51 69

Pretendo informações sobre o(s) produto(s):

- D.1
- D.2
- D.3
- D.4
- D.5
- D.6

### UNICAM

Sistemas Analíticos, Lda.  
Estrada da Rocha, nº2 - A - Apartado 47 - 2795 LINDA-A-VELHA  
Tel. (01) 414 24 80 / 88 - Fax (01) 414 20 06

Pretendo informações sobre o(s) produto(s):

- E.1
- E.2
- E.3
- E.4
- E.5

## D. SOQUÍMICA

### METROHM

#### D1. Metrodata TiNet 2.2

Software TiNet 2.2 é um programa em Windows que suporta todos os aspectos de titulação, isto é, desenvolvimento de métodos, memória para dados de amostra, curva em tempo real, guarda de resultados, reprocessamento de dados e exportação de resultados, por exemplo, para LIMS.

#### D2. Titrino 758 KFD

Display gráfico do volume do reagente em função do tempo.

Possibilidade de controlo de 2 dosímetros para dispensing (658 ou 700) e 2 auxiliares (725 ou 665).

Com um só KF pode agora ter 2 reagentes de KF com concentração diferente.

### HEWLETT-PACKARD

#### D3. Novo Amostrador Automático para HPLC

Com controlo de temperatura para efeito de peltier de  $4^\circ$  a  $40^\circ\text{C}$  (para uma temperatura ambiente de  $25^\circ\text{C}$ ). Ref.: G 1327.

Nome _____	
Morada _____	
Telefone _____	Fax _____

Nome _____	
Morada _____	
Telefone _____	Fax _____

Nome _____	
Morada _____	
Telefone _____	Fax _____

Nome _____	
Morada _____	
Telefone _____	Fax _____

**D4. Gerador de Azoto**

Com monitorização de concentração em oxigénio. Pureza do Azoto: 95 a 99,5%. Consumo de ar: 102 l/min. Fluxo de N<sup>2</sup> produzido: 16 l/min. Ref.: 5183-2004.

**D5. Dois tipos de Detector de FPD para 6890:**

a) Versão com um só comprimento de onda (single-wavelength) - faz o S e o P, um de cada vez. Ref.: G1530A - Opção 240.  
 b) Versão com dois comprimentos de onda (dual wavelength) - faz o S e o P simultaneamente. Ref. G 1530A - Opção 241.

**D6. Micro ECD de alta sensibilidade**

Maior velocidade através da zona de detecção, o que faz diminuir o tempo de residência dos compostos no detector e, portanto, diminui o risco de contaminação da célula. O detector incorpora uma inovação HP: a ânodo escondido. Por alteração de geometria, é mais difícil a contaminação atingir o ânodo. Este detector usa um liner que serve de stop físico para a coluna para optimização da instalação desta (reprodutibilidade). A sensibilidade do Micro ECD é a melhor de todas do mercado, bem como o mínimo detectável. Ref. G1530A - Opção 231.

**E. UNICAM**



**E1. Novo GC MS com a Sensibilidade FID e do ECD**

O novo Cromatógrafo de Gases com Espectrometria de Massa - Modelo GCQ, com com tecnologia Ion Trap, da nossa representativa exclusiva Finnigan, combina as capacidades e vantagens do quadrupolo e as do ion trap, resolvendo problemas analíticos num sistema com um detector universal, que supera as capacidades do detector FID, ou até o ECD ou os NPD ou FPD. Inclui ainda a nova e versátil técnica ECD - Mscm os benefícios da sensibilidade da captura electrónica e a informação da espectrometria de massa. O GCQ incorpora também as vantagens do MS MS para a identificação positiva de componentes. O modo ULTRA SIM supera o modo de varrimento SIM ate agora conhecido com níveis ultratraço de detecção mesmo em matrizes complexas.



**E2. Novo HPLC com Espectrometria de Massa "Ion Trap" Finnigan - Modelo LCQ**

O novo Cromatógrafo líquido com detector de espectrometria de massas - Mod. LCQ - é extremamente simples de utilizar e muito robusto, inclusive não são necessárias ferramentas especiais ou complicados procedimentos para a sua manutenção. A optimização do sistema é automática. Existe ainda uma potente instalação de tratamento de dados com software para processar toda a informação de forma rápida e muito simples. Podemos fornecer informação sobre as novidades que se encontram neste sistema, ou aplicações específicas como sequenciação de proteínas, produtos farmacêuticos, etc..



**E3. Tecnologia de microondas para Melhorar a produtividade do seu laboratório**

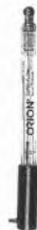
O tempo de preparação de amostras é uma das restrições mais importantes na produtividade do laboratório. Os novos sistemas para digestão em vaso fechado da MILESTONE permitem atingir pressões até 1500 psi (110 bar). No mesmo vaso pode evaporar os ácidos mais concentrados e perigosos protegendo o ambiente e o operador assim com evita a transferência de amostra. Este conceito de Processador de Amostras é o mesmo que é apresentado no método de digestão da EPA nº 3052.

Ainda existem mullas por microondas que diminuem drasticamente os consumos de energia eléctrica e reduzem bastante o tempo de calcinação das amostras. Para a determinação da humidade existem inúmeros vantagens em termos de produtividade e qualidade, como determinar o conteúdo de água de 6 amostras em menos de 15 minutos.



**E4. Novos Sistemas de Cromatografia Líquida da TSP (EX Spectra Physycs)**

As novas bombas apresentam uma estabilidade nunca antes conseguida nesta gama de produtos. Para as complementar há uma completa gama de detectores com alta performance e amostradores automáticos para melhorar a produtividade do seu laboratório. Também a TSP oferece um extensivo serviço de validação do cromatógrafo seguindo o modelo de qualificação.



**E5. Novos Eléctrodos de Iões Selectivos Combinados**

A ORION lançou recentemente uma linha completa de eléctrodos e iões selectivos combinados. O eléctrodo do ião e o da referência ficam agora numa só unidade, com todas as vantagens dos eléctrodos combinados. Uma barra de agitação magnética pode ser incorporada ao eléctrodo para uma agitação mais correcta e garantir resultados mais correctos. Peça grátis o "Guia para a análise de Iões Selectivos", com informação sobre a teoria de ISE.



## MEDIDORES DE pH DE ALTA TECNOLOGIA FÁCEIS DE USAR E ECONÓMICOS

**pH 300**

Medidor de pH/mV/°C de bancada

**pH 301**

Medidor de pH/mV/iões/°C de bancada

**pH 302**

Medidor de pH/mV/°C de bancada  
com impressora

De acordo com as GLP

**From**

**HANNA**  
instruments  
ISO 9000 CERTIFIED

**... of course**

Dos 700 funcionários do grupo Hanna,  
130 estão ao seu serviço em Portugal.

**PARA MAIS INFORMAÇÕES CONTACTE O NOSSO REVENDEDOR HANNA OU  
HANNAPRO EM VILA DO CONDE ATRAVÉS DO TEL. 052 637 184 / FAX 052 637 185**

# Chemical Web Marketing & Technology

CWM&T is  
a resource to  
assist chemical  
companies in under-  
standing the marketing  
opportunities, the trends,  
and the pitfalls of conducting  
profitable business on the Internet

**A FREE**  
monthly publication  
delivered via email

To subscribe, send an email to:  
[cwmt@chemconnect.com](mailto:cwmt@chemconnect.com)  
with 'subscribe' in the subject line

On the WWW: <http://www.betacyte.com/cwmt.shtml>

## Free Monthly Publication

brought to you by...

**ChemConnect** - The leading Internet resource for  
connecting chemical buyers and sellers worldwide.

Website: [www.chemconnect.com](http://www.chemconnect.com)

Email: [info@chemconnect.com](mailto:info@chemconnect.com)

---

**BetaCyte** - The chemical Internet presence provider  
<http://www.betacyte.com> • [info@betacyte.com](mailto:info@betacyte.com)



# Experimente irromper pela ICP-AES!



**Os espectrômetros ICP-AES da VARIAN Liberty Serie II proporcionam extraordinários limites de detecção para todos os elementos, mesmo nas mais difíceis amostras. Nenhum outro ICP-AES lhe garante:**

- Uma nova fonte RF de alta-eficiência permitindo obter excelentes resultados com solventes orgânicos difíceis, massas fundidas ou digestos oleosos.
- Um sistema de plasma de visão axial que lhe proporciona o limite de detecção que necessita mesmo nas amostras mais difíceis.
- Um sistema óptico rápido e de alta resolução para minimizar interferências espectrais.
- Além de tudo isto o novo software de operação Plasma 96 apresenta pela primeira vez a "Work-Sheet ICP". Este intuitivo software multi-tarefas baseado em Windows 95, proporciona a flexibilidade procurada e é de uso extremamente fácil.

Peça-nos catálogo descritivo.

GC • GC/MS • HPLC • AAS • ICP-AES • ICP-MS • UV-Vis-NIR • NMR • LIMS • Sample Preparation • Vacuum Products

**varian** 

**ISO 9001**  
REGISTERED

Representantes:

EMÍLIO DE AZEVEDO  
CAMPOS & CA., LDA.

**NO PORTO**  
Rua Senhora da Penha,  
110-114  
4460 Senhora da Hora  
Telef.: (02) 9531183  
Fax: (02) 9531430

**EM LISBOA**  
Rua Antero de Quental,  
17-1º / 1150 Lisboa  
Telef.: (01) 8850194  
Fax: (01) 8851397