

EDITORIAL	2
NOTICIÁRIO SPQ	
Expectativas e Incerteza: A Celebração da Química	3
Prémio Ferreira da Silva 2012 e Medalha Vicente de Seabra 2012	4
SPQ Apoia Reunião Sobre o Ensino da Química no Secundário e Partilha Preocupações dos Departamentos e dos Professores	4
Marie Curie e Einstein Finalmente na Sede da SPQ	5
XVIII Encontro Luso-Galego de Química	5
3.º Encontro Nacional de Química Terapêutica	6
10.ª Olimpíada de Ciência da União Europeia: Duas Medalhas de Prata para Portugal!	7
Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química+ 2013	9
Assembleia Geral da EuCheMS em 2012	10
ENTREVISTA	
José Luís Fontes da Costa Lima – Prémio Ferreira da Silva 2012 Entrevista conduzida por Helder Gomes e Marcela Segundo	11
ARTIGOS	
Fulerenos como Sensores Fluorescentes de Temperatura e de Oxigénio <i>Mário N. Berberan e Santos e Carlos Baleizão</i>	15
Nanotubos e Grafeno: Os primos mais jovens na família do carbono! <i>Luisa M. Pastrana-Martínez, Sergio Morales-Torres, Helder T. Gomes e Adrián M.T. Silva</i>	21
O ATP e os Atropelos da Química <i>Carlos Corrêa</i>	29
Boas Práticas de Laboratório: Como surgiram? O que são? A que se aplicam? <i>Cristina Galacho</i>	35
QUÍMICA E ENSINO	
Desvendar os Segredos das “Pedras Ferventes”. Experiências com Zeólitos ao Nível do Ensino Secundário <i>Nelson Nunes e Angela Martins</i>	41
Sistematização de Algumas Ocorrências de Recursos Educativos Digitais para o Ensino da Química <i>Carla Morais e João Paiva</i>	49
MÓDULOS INQUIRY	
“Qual é o Melhor Combustível?” Módulo Inquiry para o Estudo das Entalpias de Combustão <i>Raul Alonso e Carla Morais</i>	55
QUÍMICA PARA OS MAIS NOVOS <i>Marta C. Corvo</i>	59
DESTAQUES	63
AGENDA	67
NORMAS DE COLABORAÇÃO E INSTRUÇÕES PARA OS AUTORES	68

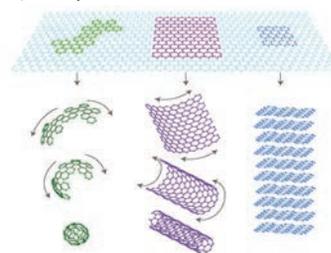
Entrevista 11

Entrevista ao Prof. José Luís Costa Lima, vencedor do Prémio Ferreira da Silva 2012, pela sua contribuição para o avanço da Química em Portugal.



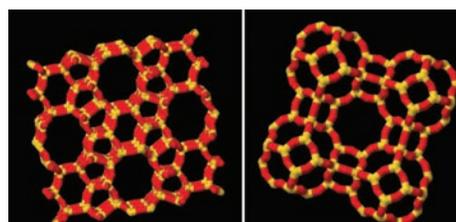
Artigo 21

Os nanotubos de carbono e o grafeno são nanoestruturas de carbono com propriedades únicas e com muitas aplicações potenciais.



Química e Ensino 41

Três experiências laboratoriais que exploram as aplicações dos zeólitos como adsorventes, permutadores iónicos e catalisadores.





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

Este número do QUÍMICA é o último editado pela atual equipa, que o acompanhou ao longo destes últimos três anos, procurando sempre divulgar a Química que melhor se faz em Portugal. A transição ocorre de uma forma natural, acompanhando a renovação dos corpos diretivos da Sociedade Portuguesa de Química para o triénio 2013-2015. Pessoalmente foi um período muito enriquecedor, pois tive o privilégio de liderar este projeto editorial durante o Ano Internacional da Química e as comemorações do centenário da fundação da SPQ e pude constatar o entusiasmo com que a comunidade de Químicos portugueses trabalha no seu dia a dia na divulgação desta ciência e o orgulho que tem na formação que abraçaram. Foram mais de novecentas páginas assinadas por mais de duzentos e cinquenta colaboradores diferentes, a que somam seguramente outras largas centenas de colaboradores indiretos que contribuíram na organização de todas as atividades e eventos relatados no Boletim. São números com uma dimensão mais que significativa para sustentar a perceção que ganhei sobre a vitalidade da nossa Sociedade e acreditar que a Química continuará em Portugal com sucesso o seu percurso de afirmação como ciência central e única capaz de solucionar os desafios que se colocam ao futuro da humanidade em domínios tão prementes como a energia, a alimentação e a exploração sustentável de recursos. Desafios em Química, é precisamente o tema do XXIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, que se realiza este ano em Aveiro, entre 12 e 14 de junho. Desejamos a participação de todos os associados e que o evento alcance o mesmo impacto e o sucesso do inesquecível Encontro que tivemos há 2 anos em Braga.

A contrastar com todo o entusiasmo aqui manifestado, os últimos três anos foram também momentos muito difíceis para o país e para os portugueses, anos marcados por uma crise económica e financeira profunda, que levaram ao aumento da taxa de desemprego para valores alarmantes e à redução generalizada do rendimento disponível das famílias, por via de cortes salariais e do aumento de impostos, uma crise com efeitos colaterais que ainda se irão arrastar por anos vindouros. Neste enquadramento recessivo e depressivo, a mensagem dada pela comunidade de Químicos portugueses foi sempre, e continua a ser sempre, uma mensagem de esperança, de motivação e de confiança num futuro alicerçado em pilares de conhecimento e de inovação. Neste capítulo, os materiais de carbono nanoestruturados surgem como materiais muito promissores, com propriedades eletrónicas, mecânicas, fotofísicas, químicas e fotoquímicas únicas, que irão permitir o desenvolvimento de uma panóplia de soluções e de comodidades para o futuro. Algumas dessas soluções são já realidade, principalmente no domínio da eletrónica, da eletroquímica, da ótica, da energia e da catálise.

Este número do QUÍMICA é por isso dedicado às nanoestruturas de carbono, mais concretamente aos fullerenos, aos nanotubos de carbono e ao grafeno. Poderá encontrar no interior deste fascículo dois artigos que pretendem elucidar os leitores menos familiarizados com o tema sobre as características destes fascinantes materiais e as suas potenciais aplicações. Neste número encontrará ainda as habituais secções, destacando aqui uma entrevista ao Professor José Luís Costa Lima, a primeira de um conjunto de entrevistas realizadas aos recentes galardoados com o Prémio Ferreira da Silva 2012 (Professores José Luís Costa Lima e Armando Pombeiro) e com a Medalha Vicente Seabra 2012 (Doutor Pedro Gois). A todos eles muitos parabéns!

Resta despedir-me de vós, agradecer toda a colaboração e apoio recebido durante estes últimos três anos e desejar todo o sucesso à nova Direção da Sociedade Portuguesa de Química e à nova equipa editorial do QUÍMICA, que surge com ânimo renovado e que estou certo de que farão um trabalho com grande dedicação e empenho em prol da nossa Sociedade.

Boa leitura!

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Textos Segundo o Novo Acordo Ortográfico

Propriedade de

Sociedade Portuguesa de Química
ISSN 0870 – 1180
Registo na ERC n.º 125 525
Depósito Legal n.º 51 420/91
Publicação Trimestral
N.º 128, jan – mar 2013

Redação e Administração

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

Editor

Helder Gomes

Editores-Adjuntos

Carlos Baleizão
Carlos Folhadela
Joana Amaral
João Paiva

Comissão Editorial

Jorge Morgado
Hugh Burrows
Joaquim L. Faria
Ana Lobo
M. N. Berberan e Santos,
A. Nunes dos Santos

Publicidade

Leonardo Mendes
Tel.: 217 934 637
Fax: 217 952 349
leonardo.mendes@spq.pt

Design Gráfico e Paginação

Paula Martins

Impressão e Acabamento

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

Tiragem

1655 exemplares

Preço avulso

€ 5,00
Assinatura anual – quatro números
€ 18,00
(Continente, Açores e Madeira)
Distribuição Gratuita aos sócios da SPQ

As colaborações assinadas são da exclusiva responsabilidade dos seus autores, não vinculando de forma alguma a SPQ, nem a Direção do QUÍMICA.

São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas.

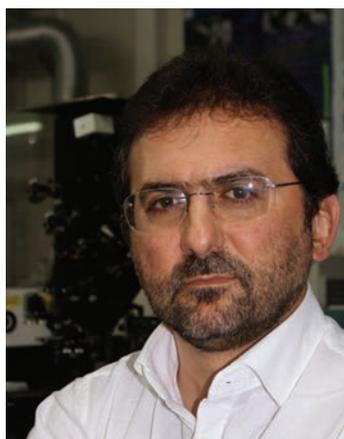
A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração podem ser encontradas no fascículo janeiro-março de cada ano e no sítio web da SPQ.

Publicação subsidiada pela

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

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

EXPECTATIVAS E INCERTEZA: A CELEBRAÇÃO DA QUÍMICA



Os dois últimos anos foram de certo modo dedicados à química: 2011 foi o Ano Internacional da Química e, por feliz acaso, foi também o Ano do Centenário da Sociedade Portuguesa de Química, cujas celebrações se estenderam a 2012. A aproximação dessas datas fez-se com enormes expectativas e incertezas, mas sobretudo com muita vontade e enorme excitação. Afinal estava ali a oportunidade de voltar a mostrar ao mundo que não havia mundo sem a química. De tão indispensável e tão intimamente ligada que está ao nosso dia a dia, a maioria das pessoas já nem se apercebe da sua importância. Tudo à nossa volta é química, ou depende da química: esse foi o mote de muito do que se fez nestes dois últimos anos.

Celebrou-se o contributo das mulheres para o desenvolvimento desta ciência, muitas vezes ignorado. Foi também a altura de entusiasmar os jovens e mostrar-lhes que a química é a ciência central cuja importância para sustentação científica e técnica da nossa sociedade é tão óbvia que dispensa justificações. Repito, a química é omnipresente nas nossas necessidades mais elementares, como respirar ou comer. E depois, por ser central, ela faz a ponte com as outras ciências e é também nas interfaces que reside parte da sua atracção, enorme diversidade e riqueza: é na separação incerta com a física que buscamos novas soluções energéticas; é na relação com a biologia que são feitos enormes avanços na área da saúde; é no rigor matemático que encontramos a sistematização necessária para a implementação

de novos processos que sustentam o nosso modo de vida. E podia continuar por este caminho, com mais exemplos.

Mas a química também é por si só, e por direito próprio, uma ciência: a ciência da transformação. A síntese de um composto a partir dos reagentes segue um mecanismo característico, com uma cinética exclusiva, com um balanço de massas e energias específico. A síntese de uma molécula simples, como o amoníaco, naquilo que é hoje conhecido como o processo de Bosch-Haber, patenteado em 1910, foi a solução para um mundo em rápido crescimento demográfico que necessitava de ser alimentado. A implicação das descobertas químicas vai quase sempre para além da euforia do momento. Elas constituem a base do desenvolvimento e foram o motor de arranque da revolução industrial e da criação de riqueza pelas nações. A descoberta nem sempre é fruto da necessidade, normalmente ela vem antes, e é a necessidade que deita mão ao portfólio do conhecimento existente.

O Ano Internacional da Química 2011 foi um ano de esforço e incerteza. As expectativas inicialmente geradas foram goradas, fruto da tensão económica que se vivia e que eclodiu na crise actual. A SPQ socorreu-se sobretudo dos seus associados, amigos e investigadores para coordenar um dos programas conjuntos mais ativos de que há memória. Foi o ano em que apesar do empenho anunciado de dezenas de nações, a SPQ viu cortados significativamente os seus apoios nacionais. A todas as empresas, instituições, universidades, escolas e pessoas que acreditaram neste projeto e viveram connosco a permanente insegurança desses dias, mas mesmo assim avançaram, o nosso obrigado. O ano seguinte, 2012, veio confirmar as piores expectativas para a química no panorama nacional. O número de projetos científicos financiados pela FCT foi o mais baixo de sempre e o número de projetos em química e engenharia química catastroficamente exíguo. Percorrendo a lista de projetos aprovados

nestas duas áreas, é evidente que foi sobretudo nas interfaces que houve algum sucesso (se é que se pode usar o termo, em face de tão pobre panorama). Ao nível do ensino universitário, houve um decréscimo considerável na procura dos cursos de química e de engenharia química. No ensino secundário, de várias escolas chegaram-nos repetidos pedidos de apoio (de professores e alunos) para justificar a manutenção de pelo menos uma turma de química no 12.º ano. Todos sentem que neste ano pré-universitário a disciplina é uma mera opção de catálogo, demasiado fragilizada face à estrutura de avaliação, no desconexo panorama da organização curricular.

Uma nação é seguramente mais do que política e economia. A verdadeira riqueza está no conhecimento; nenhum país possui recursos ilimitados e a história já nos mostrou como os ciclos de prosperidade podem redundar abruptamente na mais profunda das misérias. A formação de indivíduos capazes, por meio de uma educação científica e técnica sólida e sustentada – onde o lugar da química é inquestionável – é a chave do desenvolvimento.

A equipa que agora termina o mandato, e que teve o privilégio de integrar, fez o que estava ao seu alcance, ao serviço da SPQ, ao serviço da química, ao serviço dos químicos portugueses, presentes e futuros. Tenho que agradecer às pessoas que me acompanharam, apoiaram e trabalharam, árdua e desinteressadamente, nesta época desagradável de contratempos e dificuldades. Foram elas que permitiram conduzir este mandato às mãos dos nossos sucessores. Certo é que continuarei a dar o meu contributo, mas a outro nível, pois é tempo de renovar, dar lugar a novas pessoas com novas ideias e novo querer, sabendo de antemão que o seu trabalho não será fácil nas condições adversas que atravessamos. Sem dúvida a nova equipa da SPQ e os seus associados estarão à altura dos acontecimentos. Bem hajam e felicidades.

Joaquim Luís Faria
(jlfaria@fe.up.pt)
Secretário Geral da SPQ

PRÉMIO FERREIRA DA SILVA 2012 E MEDALHA VICENTE DE SEABRA 2012

O Prémio Ferreira da Silva foi instituído pela Sociedade Portuguesa de Química em 1981, sendo atribuído com carácter bienal a um químico português que, pela obra científica produzida em Portugal, tenha contribuído significativamente para o avanço da Química, em qualquer das suas áreas. Já a Medalha Vicente Seabra, instituída mais recentemente pela SPQ, nomeadamente em 2002, tendo sido atribuída pela 1.ª vez em 2004 durante o XIX Encontro Nacional da SPQ, destina-se a premiar a alta qualidade, originalidade e autonomia do trabalho

de investigação em Química desenvolvido em Portugal por um investigador de idade não superior a 40 anos.

O júri do Prémio Ferreira da Silva 2012 e da Medalha Vicente de Seabra 2012 reuniu na sede da SPQ, no dia 10 de dezembro de 2012, decidindo a atribuição, por unanimidade, do Prémio Ferreira da Silva 2012, ex-aequo, a *Armando José Latourette de Oliveira Pombeiro*, Professor Catedrático do Instituto Superior Técnico (UTL) e a *José Luís Fontes da Costa Lima*, Professor Catedrático da Faculdade de

Farmácia da Universidade do Porto. Decidiu ainda atribuir a Medalha Vicente de Seabra 2012 a *Pedro Miguel Pimenta Góis*, Investigador Auxiliar da Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa. Os premiados proferirão conferências no próximo Encontro Nacional da SPQ, a realizar em Aveiro entre 12 e 14 de junho deste ano.

Joana Amaral
(bquimica@ipb.pt)
www.spq.pt

SPQ APOIA REUNIÃO SOBRE O ENSINO DA QUÍMICA NO SECUNDÁRIO E PARTILHA PREOCUPAÇÕES DOS DEPARTAMENTOS E DOS PROFESSORES

Por iniciativa do Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, e com o apoio da SPQ, realizou-se no dia 9 de janeiro, no Porto, uma reunião de departamentos de Química, Engenharia Química e áreas afins, com a presença de representantes da FCUP, FEUP, UTAD, UM, UBI, UA, UC, IP de Tomar, ISEL, IST, FCUL e UAlg.

A necessidade desta reunião foi despoletada pela forma como o Ministério da Educação tem vindo a tratar o ensino da química. A centralidade da química como ciência de base e a sua importância para a formação científica e técnica dos nossos jovens é de tal modo evidente que não se justifica qualquer tipo de argumentação comparativa relativamente às demais ciências. Seria como justificar a necessidade de nos alimentarmos para nos desenvolvermos saudavelmente.

Olhando para a situação que se vive é possível identificar vários sinais preocupantes, que deixam todos os responsáveis pelo ensino da química apreensivos. O sistema actual de acesso ao ensino superior, as condições frágeis de natureza laboratorial, a (curta) carga horária e a organização curricular não ajudam o ensino experimental, incontornável na ciência química.

Além do corte de carga lectiva nesta importante disciplina, acresce alguma dispersão para a adaptação necessária nas escolas. Esta situação demonstra falta de sensibilidade à formação científica em geral e ao desenvolvimento da educação química, em particular. A tendência para a sistematização desmesurada da avaliação face ao ensino conduziu a um desenquadramento entre a extensão dos programas, a duração dos períodos lectivos e a colocação dos momentos de avaliação.

Os programas curriculares de química precisam de ser reformulados, nomeadamente recentrando-os em conceitos estruturantes (mais do que em contextos) e removendo alguma dispersão, alguns vazios e alguma amplitude (em muitos casos a extensão demasiada prejudica a qualidade das abordagens). É evidente a desconexão e a falta de continuidade no secundário, sobretudo na passagem do 11.º para o 12.º ano.

Identificados alguns dos problemas, tornou-se óbvia a necessidade de um debate alargado no seio das instituições com responsabilidade no ensino desta disciplina. A presente reunião foi a forma encontrada para dar início a um processo construtivo de resolução das questões identificadas. Iniciou-se

com uma interessante apresentação de José Ferreira Gomes sobre alguns aspectos da situação internacional e nacional da química e do seu ensino. Seguiram-se várias intervenções e trocas de pontos de vista sobre a colocação dos exames no currículo, a estrutura e redução dos programas, o ensino experimental, as restrições sobre a constituição de turmas de 12.º ano, o acesso ao ensino superior, entre outros pontos.

Da reunião resultou um documento que será apresentado ao Ministro da Educação e que assentará num conjunto de recomendações básicas ao nível da formação experimental dos estudantes, da organização curricular, sobretudo ao nível do 12.º ano, onde a posição da química está demasiado fragilizada face à actual estrutura de avaliação e, finalmente, a revisão curricular dos programas específicos de química, sobretudo ao nível do secundário, no que respeita à extensão e conteúdo. O documento encontra-se em fase de revisão para ser apresentado ao gabinete do Ministro da Educação, após a qual será disponibilizado no portal da SPQ.

Direção da SPQ
(sede@spq.pt)
www.spq.pt

MARIE CURIE E EINSTEIN FINALMENTE NA SEDE DA SPQ

Após uma viagem algo atribulada, desde 30 de novembro que finalmente se encontra a decorar as instalações da Sede da Sociedade Portuguesa de Química a peça de artesanato “Einstein com Marie Curie”, vencedora do concurso INOVARTE 2011, promovido pela ADERE-Minho com o apoio da SPQ, e dedicado ao tema “Ano Internacional da Química” (tal como noticiado no QUÍMICA 122).

A peça, com cerca de 50 cm de altura, é da autoria de Manuel Macedo, artesão natural de Barcelos, uma região minhota onde por tradição se trabalha o barro.

É em Galegos de S^{ta} Maria que Manuel Macedo dá forma e cor às suas criações e onde diz que “tudo começa com um rolo de barro. A partir daí ...!”. A partir daí aparecem figuras de san-

tos, músicos, minhotas e gentes do campo e das profissões. Nestas, na categoria dos cientistas, apareceram Marie Curie e Einstein, que ficarão na sede da SPQ a lembrar que 2011, ano do centésimo aniversário da Sociedade, foi o Ano Internacional da Química.

João Paulo André
(jandre@quimica.uminho.pt)
Universidade do Minho



O artesão Manuel Macedo



“Einstein com Marie Curie” – amigos em vida e agora juntos na SPQ

XVIII ENCONTRO LUSO-GALEGO DE QUÍMICA

O XVIII Encontro Luso-Galego de Química decorreu de 28 a 30 de novembro de 2012 na Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, em Vila Real. Participaram mais de 240 investigadores vindos de Portugal e de Espanha, tendo sido apresentados mais de 190 trabalhos de investigação. Os Encontros Luso-Galegos de Química têm por objetivo o intercâmbio científico e tecnológico entre Portugal e a Galiza e têm a particularidade de serem especialmente dedicados aos investigadores mais jovens (estudantes de graduação, pós-graduação e recém-doutorados). Desde o seu início, em 1985, o Encontro tem servido o propósito de estabelecer pontes de contacto entre académicos e industriais, com interesses comuns nos aspetos fundamentais e aplicados da Química. O Encontro, este ano com a organização a cargo do Departamento de Química da UTAD, resulta da estreita relação existente entre a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), o Colégio Oficial de Químicos (COLQUIGA) e a Associação dos Químicos da Galiza (AQUIGA).

Ao longo destes três dias debateram-se assuntos relacionados com múltiplos temas das Ciências Químicas, divididos em diferentes áreas: Química Fundamental; Química Industrial e Tecnologia; Química Agro-Mar-Alimentar; Química Ambiental; Bioquímica e Biotecnologia; Nanoquímica e Nanotecnologia; Química e Saúde; Química e Energia; Educação e Ensino da Química.

O Encontro manteve a sua estrutura habitual tendo como ponto de partida 5 lições plenárias convidadas, apresentadas na Aula Magna da UTAD:

- LP 1 – Gianluca Li Puma, Universidade de Loughborough, Inglaterra
Semiconductor photocatalysis and photoreaction engineering for environmental and renewable energy applications
- LP 2 – Juan Mogín del Pozo, Colegio Oficial de Químicos de Galicia
Presente y futuro del papel de la química en el campo de la Gestión de Residuos
- LP 3 – Jorge Calado, Departamento de Engenharia Química, IST, Universidade de Lisboa
A História da Energia
- LP 4 – Víctor Freitas, Departamento de Química, FCUP, Universidade do Porto
Contribuição dos polifenóis para as características sensoriais de vinhos tintos

- LP 5 - Héctor Rodríguez Martínez, Universidade de Santiago de Compostela

Ionic liquids for better processes

O Encontro, como é já tradicional, subdividiu-se em sessões orais paralelas, com a duração de 10-15 minutos, que decorreram em 3 auditórios em simultâneo (Auditórios 1, 2 e Geociências) e na apresentação de comunicações em forma de painel (distribuídas ao longo dos corredores do 1.º andar do edifício da Reitoria e do edifício de Geociências da UTAD). Realizou-se ainda, na tarde do dia 30 de novembro (sexta-feira), um mini-Simpósio dedicado aos Líquidos Iónicos, que teve como comunicação final convidada a Keynote de Luis Paulo Rebelo (ITQB) intitulada: Salty Chemistry: Fundamentals, Applications and Case Studies involving Ionic Liquids.

De uma forma complementar, ao longo dos três dias, realizaram-se várias atividades:

- Uma wine party com a prova de diferentes vinhos do Douro (tarde de quarta-feira);
- Um concerto de piano na Aula Magna da UTAD, pelo pianista brasileiro Humberto Luiz (final da tarde de quarta-feira);
- Uma sessão de autógrafos do Prof. Jorge Calado, autor do livro Haja Luz, na manhã de quinta-feira;
- O jantar do Encontro, realizado no Hotel MiraCorgo (Vila Real), na noite de quinta-feira;
- Uma exposição de material, reagentes e equipamentos da área da Química, de diversas empresas,



Sessão de abertura



Lição plenária de Gianluca Li Puma (Universidade de Loughborough, Inglaterra)

no átrio da Aula Magna, patente ao longo dos 3 dias do Encontro.

Químicos da Galiza e será realizado em Vigo, em novembro de 2013.

No próximo ano a organização do XIX Encontro Luso-Galego de Química estará a cargo do Colégio Oficial de

José Alcides Peres
(jperes@utad.pt)
Comissão Organizadora

3.º ENCONTRO NACIONAL DE QUÍMICA TERAPÊUTICA

Nos dias 28 a 30 de novembro de 2012 teve lugar, na Universidade de Aveiro, o 3.º Encontro Nacional de Química Terapêutica (3.º ENQT). Tal como nos dois encontros anteriores (Porto e Coimbra), este congresso proporcionou aos seus participantes a possibilidade de apresentar e discutir os avanços mais recentes e as

perspetivas futuras na descoberta e desenvolvimento de fármacos, com ênfase especial nas interfaces entre Química, Biologia, Bioquímica Estrutural e Computacional e Medicina.

Os primeiros dois dias contaram com 4 lições plenárias proferidas por cientistas de renome mundial na Quími-

ca Terapêutica, vindos da academia e da indústria, 6 lições convidadas e 18 comunicações orais proferidas por investigadores de diversos centros portugueses onde se desenvolve Química Terapêutica e também por investigadores portugueses no estrangeiro. Este encontro incluiu no seu terceiro dia o 1.º Simpósio Luso-Espano-Bra-

sileiro em Química Medicinal. Este constou de 6 lições plenárias proferidas por investigadores dos três países envolvidos neste projeto ambicioso de iniciar um congresso envolvendo os países Ibéricos e o Brasil, com possibilidade de ser estendido a outros países da América do Sul. Estes três dias de congresso foram enriquecidos com as três sessões muito concorridas e bastante animadas em termos de discussão científica das 130 comunicações em cartaz apresentadas. O interesse demonstrado pelos 220 participantes inscritos neste congresso, incluindo investigadores seniores e muitos estudantes de licenciatura, mestrado e doutoramento, revela que a Química Terapêutica/Medicinal já atingiu a maioria em Portugal e que possui todas as condições para continuar em franco desenvolvimento.

O 3.º ENQT foi precedido de um congresso satélite, o encontro em “*Natural Products and related Redox Catalysts: Basic Research and Applications in Medicine and Agriculture – (RedCat)*”, que se realizou entre os dias 25 e 27 de novembro de 2012,

também na Universidade de Aveiro. O RedCat é uma rede de formação de investigadores em início de carreira (estudantes de doutoramento) e investigadores mais experientes (bolsistas de pós-doutoramento), financiada no âmbito do 7.º programa quadro da União Europeia. RedCat teve início em dezembro de 2008 e encerrou em novembro de 2012, tendo este encontro constituído o seu término. RedCat possibilitou a 10 estudantes de doutoramento e 4 investigadores de pós-doutoramento a possibilidade de levarem a cabo a sua formação e desenvolver trabalho de investigação em vários laboratórios europeus (10 instituições parceiras e 8 associadas de 5 países Europeus – Alemanha, França, Luxemburgo, Portugal e Reino Unido). A investigação desenvolvida no âmbito da rede RedCat envolveu química de produtos naturais, processos redox intracelulares, desenvolvimento de medicamentos e agricultura ecológica. Este congresso RedCat permitiu apresentar a investigação desenvolvida ao longo dos seus 4 anos de vigência, mas também a participação de investigadores/

oradores de renome mundial nas áreas da Química, Bioquímica, Biologia, Ciências Farmacêuticas, Medicina e Agricultura, os quais proferiram conferências com os resultados científicos e tecnológicos mais recentes nestas áreas. Este congresso satélite contou com cerca de 90 participantes, 7 lições plenárias, 4 lições convidadas, 13 comunicações orais e 28 comunicações em cartaz. Estas foram apresentadas e discutidas com elevado rigor e espírito crítico em duas sessões bastante concorridas.

Em resumo, de dia 25 a 30 de novembro de 2012 estiveram na Universidade de Aveiro excelentes investigadores seniores e juniores e outros ainda aspirantes a sê-lo, apresentando e discutindo as mais recentes novidades, inovações científicas e tecnológicas e os desafios emergentes na área da Química Terapêutica/Medicinal.

Artur Silva

(artur.silva@ua.pt)

Chairman do 3.º ENQT e do RedCat



Momentos vividos no ENQT

10.ª OLIMPIADA DE CIÊNCIA DA UNIÃO EUROPEIA: DUAS MEDALHAS DE PRATA PARA PORTUGAL!

A Olimpíada da Ciência da União Europeia é uma competição destinada a estudantes do ensino secundário, na faixa etária dos 16 anos, pretendendo estimular a escolha de carreiras científicas, desenvolver talentos, proporcionar troca de experiências e contactos entre estudantes que poderão vir a participar nas Olimpíadas Internacionais da Ciência, além de comparar os

currícula e as perspetivas do ensino das ciências entre os Estados-membros da União Europeia.

A décima Olimpíada da Ciência da União Europeia (10th European Union Science Olympiad, 10th EUSO) decorreu em Vilnius, na Lituânia, de 22 a 29 de abril de 2012, organizada pela Universidade de Vilnius e pelo Ministério

de Educação e Ciência, em parceria com Sociedades Científicas, e tendo como “Honorary Patron” o Presidente lituano, Valdas Adamkus. De destacar a organização exemplar do evento, quer nos aspetos mais diretamente relacionados com as provas da competição, quer nas iniciativas culturais e recreativas organizadas para professores e alunos, com um grande

envolvimento das autoridades governamentais e locais da Lituânia.

Esta foi a quarta vez que Portugal participou nesta competição científica europeia, traduzindo-se numa vivência única para os nossos estudantes que, além da participação na competição, puderam contactar com investigadores e estudantes de outras nacionalidades, perspetivando-lhes o que se desenvolve a nível científico nos diversos países europeus. Foi possível observar *in loco* toda a logística que envolve uma competição desta natureza, as parcerias envolvidas na organização da mesma e a forma entusiástica como os estudantes aderem a este tipo de iniciativas, que podem influenciar muitos na escolha de carreiras científicas, indo ao encontro de um dos desígnios europeus de “Aumentar os Recursos Humanos em Ciência e Tecnologia”.

Naturalmente, os contactos formais e informais que ocorreram ao longo da semana da competição foram da maior relevância também para os professores, com o acesso a informações sobre os processos utilizados nos diversos países concorrentes para seleção e preparação das equipas para a EUSO, além da troca de experiências sobre o ensino das ciências.

Participaram 22 países com duas equipas, cada uma das quais com três alunos. As duas equipas que re-

presentaram Portugal foram selecionadas numa prova que decorreu na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa (FCTUNL), à qual concorreram os três primeiros classificados nas Olimpíadas de Química Júnior e de Física, Escalão A, em 2010, e os três primeiros classificados das Olimpíadas de Biologia de 2011, que reuniam os requisitos de idade exigidos para esta competição. Esta prova foi elaborada de acordo com o Protocolo celebrado entre a ex-DGIDC, a Sociedade Portuguesa de Física, a Sociedade Portuguesa de Química e a Ordem dos Biólogos.

Os seis estudantes com melhores resultados integraram as duas equipas que representaram Portugal: Luis Martins Baptista Franco, Guilherme Afonso Santana Oliveira, Ana Rita Sousa Nóia de Mendonça Bello, João Luís Sousa Janela, Teresa Patrícia Pedrosa Martins e Rodrigo Manuel Robalo Curado de Vilares Morgado. Estes estudantes participaram na competição europeia acompanhados pelas professoras Isaura Vieira (Coordenadora Nacional da EUSO), Maria das Dores Ribeiro da Silva (mentora da Química), Célia Henriques (mentora da Física) e Joana Capucho (mentora da Biologia).

De salientar que os alunos selecionados tiveram uma preparação experimental e científica adicional, na Facul-

dade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa e no Instituto Nacional de Recursos Biológicos, a cargo das sociedades científicas, bem como através de uma plataforma *online*. Colaboraram também nessa preparação os professores das escolas frequentadas pelos estudantes.

A participação portuguesa na EUSO é organizada conjuntamente pela Direcção-Geral da Educação (DGE), pela Sociedade Portuguesa de Física (SPF), pela Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e pela Ordem dos Biólogos (OB). Nos termos de protocolo celebrado entre a SPQ, a SPF, OB e a ex-DGIDC as sociedades científicas asseguraram o respetivo mentor e a preparação dos alunos. A DGE coordenou os trabalhos de preparação, suportou as despesas dos estudantes e dos acompanhantes relativas às sessões presenciais de preparação, e ainda os aspetos logísticos e despesas da participação internacional.

As provas da competição incidiram em atividades experimentais, integrando conteúdos de Biologia, de Química e de Física, com o objetivo de testar as capacidades dos alunos na resolução de problemas científicos, bem como capacidades de natureza processual. As provas foram bastante exigentes, requerendo um elevado grau de concentração por parte dos estudantes, envolvendo bastante raciocínio, reflexão sobre os textos e capacidade de apreensão dos aspetos descritos e dispersos, relevantes para a resolução das questões.

Aos mentores, como membros do Júri Científico Internacional, coube a tarefa de avaliarem as condições laboratoriais disponibilizadas para as provas, a discussão de alguns aspetos relacionados com o conteúdo das mesmas e a sua tradução. Durante a visita aos laboratórios da Universidade de Vilnius, foi possível constatar as boas condições oferecidas para a execução de trabalho laboratorial (instalações e equipamentos) inerente às duas provas práticas. A tradução das provas constituiu uma tarefa morosa, mas o excelente espírito de cooperação existente na equipa facilitou o trabalho.

Os nossos estudantes tiveram uma participação muito positiva, tendo efe-



Representação portuguesa na EUSO2012 acompanhada por duas guias locais

tuado um grande esforço para corresponder a um tipo de prova difícil para a sua formação académica. O resultado muito positivo compensou o esforço: cada uma das equipas conseguiu uma medalha de prata! Será de destacar que este resultado só foi alcançado pelo trabalho dos alunos, pelo ensino que lhes foi ministrado nas suas escolas e pela preparação adicional que lhes foi ministrada, na qual as sociedades científicas tiveram um papel determinante, conjuntamente com os professores das escolas dos alunos.

Em linhas gerais, podemos dizer que os trabalhos decorreram de acordo com o programa previsto, havendo atividades culturais e/ou desportivas organizadas especificamente para os estudantes nos dias em que estes não estavam envolvidos na competição e os mentores estavam envolvidos nos trabalhos de discussão, tradução e correção dos testes. Foram programadas igualmente atividades culturais para os mentores e atividades conjuntas para mentores e alunos.

De referir, por ser o primeiro ano que se realizou, o evento internacional que ocorreu na noite de 24 de abril, no qual cada país, para além de pre-



Equipas portuguesas (agraciadas com medalhas de prata) participantes na EUSO2012, na cerimónia de encerramento

parar uma mesa com comida tradicional, teve que fazer uma apresentação salientando os aspetos mais relevantes da sua identidade. Neste evento estiveram presentes embaixadores de vários países, designadamente da Áustria, da República Checa, da Alemanha, da Hungria e da Irlanda.

A participação de Portugal na EUSO 2012 traduziu-se numa experiência

muito enriquecedora para todos os participantes, com um regresso a Portugal de ânimo elevado por um justificado orgulho do desempenho.

**Isaura Vieira e Maria das Dores
Ribeiro da Silva**
(mdsilva@fc.up.pt)

Acompanhantes da equipa portuguesa

FASE REGIONAL DE BRAGANÇA DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA⁺ 2013

Decorreu no dia 31 de janeiro de 2013, na Escola Superior de Tecnologia e Gestão do Instituto Politécnico de Bragança (IPB), a oitava edição da Fase Regional de Bragança das Olimpíadas de Química⁺. A organização do evento coube, uma vez mais, ao Departamento de Tecnologia Química e Biológica em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Este ano a prova laboratorial incidiu na determinação da percentagem de hipoclorito de sódio numa lixívia comercial.

Estiveram em prova um total de 63 alunos distribuídos por 21 equipas provenientes de 5 escolas do distrito, nomeadamente Colégio Torre Dona Chama, Escola ES/3 Emídio Garcia de Bragança, Escola EB2,3/S de Macedo de Cavaleiros, Escola Secundária

Miguel Torga de Bragança e Escola Secundária/3 de Mirandela. No final da prestação, todos os alunos e professores acompanhantes almoçaram na cantina do IPB, após o que regressaram ao auditório para a sessão de divulgação de resultados.

No seguimento de anos anteriores, foram atribuídos certificados de participação a todos os alunos e professores, bem como os desejados prémios atribuídos às 3 melhores equipas e às 3 melhores escolas. Para entregar o prémio “Crédito Agrícola” às 3 melhores equipas, correspondendo à abertura de uma conta na Caixa de Crédito Agrícola Mútuo no valor de 100€, 75€ e 50€ para cada um dos alunos das equipas que ficaram, respetivamente, na 1.^a, 2.^a e 3.^a posições, esteve presente a Dra. Carla Pimentel Dias.

As equipas que arrebataram as três primeiras posições, e como tal receberam o prémio “Crédito Agrícola”, foram as seguintes:

Medalha de Ouro

Escola: Escola Secundária/3 de Mirandela

Professores acompanhantes:
Marília Vinhais e Matilde Coroado

Equipa: David Pires Martins, Francisco Caçador e José Guilherme Matos

Medalha de Prata

Escola: Escola EB2,3/S de Macedo de Cavaleiros

Professor acompanhante:
Nuno Calisto

Equipa: Alexandra Sousa, Joel Pires, João Pedro Carvalho

Medalha de Bronze

Escola: Escola EB2,3/S de Macedo de Cavaleiros

Professor acompanhante:
Nuno Calisto

Equipa: Ana Rita Marcos, Daniela Fernandes, Diogo Magalhães

As 3 escolas melhor classificadas foram premiadas com o financiamento da sua participação na Semifinal do Porto das Olimpíadas de Química*, financiamento este que inclui os gastos com a deslocação (patrocínio da Câmara Municipal de Bragança) e

alojamento das equipas (patrocínio do Crédito Agrícola). Este ano foi muita a emoção no momento do anúncio da escola classificada no 3.º lugar, já que se tratou de uma estreia! No que respeita à classificação escolas, ficaram classificadas em 1.º, 2.º e 3.º lugares, respetivamente, a Escola Secundária/3 de Mirandela, a Escola EB2,3/S de Macedo de Cavaleiros e o Colégio Torre Dona Chama.

Novamente, e mesmo em “tempos de crise económica”, este evento contou com o já habitual e indispensável patrocínio monetário do **Crédito Agrí-**

cola e com o apoio da **Câmara Municipal de Bragança** na deslocação à Semifinal do Porto, pelo que deixamos uma palavra especial de agradecimento a ambos os patrocinadores, o nosso *Muito obrigada* por continuarem a fazer possível a realização desta “festa da química” que se vive no dia das provas da Fase Regional de Bragança das OQ+.

Joana Amaral
(jamaral@ipb.pt)
Coordenadora da Fase Regional de Bragança das OQ+



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

ASSEMBLEIA GERAL DA EUChEMS EM 2012

A Assembleia Geral da EuChEMS decorreu nos dias 11 e 12 de outubro de 2012, no Instituto de Química em Dublin, Irlanda, tendo reunido representantes das diversas Sociedades membro da EuChEMS e outras organizações associadas, representantes das Divisões, Grupos de Trabalho e do Conselho Executivo da EuChEMS e da Rede Europeia de Jovens Químicos, entre outros. Ulrich Schubert presidiu a Assembleia Geral, tendo dado início à reunião informando os parti-

cipantes sobre as atualizações mais recentes relativas aos objetivos estratégicos da EuChEMS. Livia Simon Sarkadi, Nineta Majcen e Cristina Todasca complementaram a sua apresentação com atualizações sobre as atividades levadas a cabo nas áreas científicas das Divisões e Grupos de Trabalho da EuChEMS, entre outras.

A reunião contou ainda com dois painéis de discussão: “*What are the European needs of member societies?*”

e “*Combining forces for Horizon2020*”. As apresentações proferidas no âmbito desta reunião podem ser consultadas em <http://www.euchems.eu/about/general-assembly/2012-dublin-ireland/presentations-ga-2012.html>.

(adaptado de EuChEMS newsletter, fevereiro de 2013)

Joana Amaral
(bquimica@ipb.pt)
www.spq.pt

JOSÉ LUÍS FONTES DA COSTA LIMA

PRÉMIO FERREIRA DA SILVA 2012

ENTREVISTA CONDUZIDA POR
HELDER GOMES E MARCELA SEGUNDO



O Professor José Luís Costa Lima foi galardoado com o Prémio Ferreira da Silva 2012. Este prémio, instituído pela Sociedade Portuguesa de Química em 1981, tem como objetivo o reconhecimento de químicos portugueses que, pela obra científica produzida em Portugal, tenham contribuído significativamente para o avanço da Química em qualquer das suas áreas. Em particular, o Prof. Costa Lima é responsável pela criação de uma autêntica escola de Química Analítica. Quisemos conhecer melhor o seu percurso académico e científico, bem como o que pensa sobre as perspetivas do futuro da ciência e do ensino superior em Portugal.

BQ: Parabéns pela obtenção do Prémio Ferreira da Silva, atribuído pela SPQ como reconhecimento da sua carreira científica. Como recebeu esta notícia? Foi inesperada, ou foi recebida com naturalidade?

CL: Tomei conhecimento por colaboradores que o meu CV estava a ser preparado para a candidatura... e mais me disseram: “Veja lá, não vá assinar a candidatura de outro concorrente!”.

BQ: Realizou a sua formação académica inicial (licenciatura em 1970 e doutoramento em 1985) na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto e integrou o Departamento de Química desta mesma Faculdade em 1971. Em 1986 aceita o convite para lecionar na Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto, onde obteve posteriormente a agregação em 1995. O que o motivou para esta mudança da Faculdade de Ciências para a Faculdade de Farmácia?

CL: Foi motivada pelo convite do Prof. Roque da Silva, que me desafiou para criar um grupo de Química de raiz na FFUP de uma forma que lhe era muito característica: “Eu não tenho nada mas dou-lhe tudo”.

BQ: O Prof. Costa Lima é conhecido como o criador de uma verdadeira escola na área da Química Analítica.

Como começou a sua relação com a Química Analítica?

CL: Eu sempre pensei que o Ensino e a Investigação deviam estar ligadas às necessidades objetivas do país. Acho que era uma área carenciada em Portugal, onde os químicos poderiam evidenciar a sua utilidade. Infelizmente este objetivo ainda não está inteiramente cumprido, sobretudo num ambiente em que a publicidade dissemina a ideia de que algo “sem químicos” é bom!

BQ: É responsável por um total de doutoramentos orientados/coorientados superior a 40, possuindo vários “filhos científicos”, como apelida os doutorados orientados/coorientados por si, e vários “netos” e “bisnetos”, doutorados orientados/coorientados pelos seus “filhos” e “netos”, respetivamente. Que características científicas e humanas procura inculcar nos alunos que orienta?

CL: Incuto sobretudo a ideia de que devem sentir-se felizes na investigação, quando não se sentirem assim, devem desistir...

BQ: E estes seus “filhos”, “netos” e “bisnetos”, continuaram todos a realizar investigação na área da Química Analítica?

CL: Felizmente sim!

BQ: O seu currículo é notável, possui uma produção científica muito elevada, sendo co-autor de mais de 450 artigos em revistas internacionais com arbitragem científica, com um índice-h de 32 e mais de 5500 citações. Esta performance foi inclusivamente reconhecida em 2004 pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia com o Prémio Estímulo à Ciência. De todas as suas publicações há alguma que queira destacar em particular?

CL: Gostava! Uma modesta publicação na *Hydrometallurgy* que apareceu porque um velho amigo que trabalhou comigo descobriu um caderno de laboratório com mais de 30 anos, contendo uns resultados de um trabalho sugerido por mim e que ele achava que mereciam ser publicados. E 30 anos depois o artigo saiu...

BQ: Uma das colaborações que manteve com investigadores de outros países, foi com o grupo de investigação do Prof. Elias Zagatto, do Brasil, com quem teve oportunidade de desenvolver duas técnicas de automatização (análise por multi-comutação e por multi-impulsão), baseadas em condições de não-equilíbrio químico no momento da execução das medições analíticas. Que impacto teve o desenvolvimento destas duas técnicas no seu percurso científico?

CL: Particularmente a análise por multi-impulsão, que consistia numa heresia aos conceitos vigentes no tempo (2004), é algo que teve uma forte influência nos trabalhos desenvolvidos nos anos seguintes pelo grupo de investigação. Neste aspeto, não poderia deixar de destacar o papel muito relevante que o meu colega João Luís Santos teve no desenvolvimento desta heresia.

BQ: Uma outra faceta do Prof. Costa Lima é a sua estreita ligação com a SPQ, onde tem sido um membro extremamente ativo. Integrou a Direção da SPQ, foi Presidente da Divisão de Química Analítica, é o Presidente atual da Delegação do Porto, entre muitas outras atividades e organizações. Como vê a dinâmica atual da SPQ, como perspetiva o seu futuro e o que sentiu por ver a nossa Sociedade comemorar os seus 100 anos de existência?

CL: A vida da SPQ como sociedade científica será sempre difícil, assim como a atividade daqueles que a ela se dedicam, num Universo tão restrito como é o dos sócios da SPQ. Não poderemos nunca aspirar a uma atividade mais visível, principalmente se comparada com entidades que disponham como elemento agregador a defesa da atividade profissional.

BQ: É atualmente o Diretor da Faculdade de Farmácia e integra os órgãos

de gestão desta instituição de ensino superior há já mais de uma década. Como vê o futuro da Faculdade de Farmácia, da ciência e do ensino superior em Portugal?

CL: Têm-se assistido nos últimos tempos a uma perigosa uniformização e centralização do Ensino Superior. Eu penso que as Escolas que forem capazes de manter a sua identidade serão imprescindíveis na formação das novas gerações no futuro.

BQ: A entrevista chegou ao fim, agradecemos imenso o tempo que nos disponibilizou e uma vez mais parabéns pela sua magnífica carreira científica.

CL: Muito obrigado!

NOTA BIOGRÁFICA DO PROFESSOR JOSÉ LUÍS COSTA LIMA

José Luís Fontes da Costa Lima, nascido a 5 de dezembro de 1945, frequentou na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (FCUP) a Licenciatura em Química, que concluiu em 1970. Ingressou então no Departamento de Química da FCUP como Técnico Analista e Assistente de investigação, tendo interrompido estas funções para prestação de Serviço Militar entre 1973 e 1975. A partir de 1977 trabalhou com o Prof. Adélio Machado (FCUP), que orientou a sua tese de doutoramento versando sobre elétrodos seletivos de iões, apresen-

tada em dezembro de 1985. Durante este período teve a oportunidade de estagiar na Universidade do País de Gales, sob a supervisão dos Professores G. J. Moody e J. D. R. Thomas, desenvolvendo trabalho na área da eletroquímica.

Em 1986 ingressou como Professor Auxiliar na Faculdade de Farmácia da U. Porto (FFUP), a convite do Prof. Roque da Silva, com o objetivo de criar um grupo dedicado à Química Analítica e Aplicada, com investigação compatível com os objetivos do ensino da Química em Ciências Farmacêuticas.

Este desafio originou a criação de uma verdadeira escola de Química Analítica, em diversas vertentes, consubstanciada na formação de mais de 40 doutores, a quem gosta de apelar de “filhos científicos”, que por sua vez formaram outros doutores (“netos”), e estes formaram outros (“bisnetos”), continuando o seu legado de investigação na FFUP e em outras instituições. É por isso imprescindível mencionar a marca indelével que deixa nos seus ex-alunos, a nível graduado e pós-graduado, precisamente pelos valores que personifica e incute: gosto pela ciência, trabalho abnegado, dedicação inexcedível, grande humanidade e amizade. Atualmente tem ainda um papel importante na FFUP, sendo presentemente Diretor desta instituição.



Prof. José Luís Costa Lima na FFUP (imagem cedida por Ana Carvalho)



Prof. José Luís Costa Lima junto ao retrato do Prof. Ferreira da Silva na FFUP (imagem cedida por Joana Macedo)

Os seus trabalhos de maior impacto na comunidade científica versam sobre a automatização de análises químicas e bioquímicas, tendo criado novos conceitos nesta área através da introdução de elementos de comutação múltipla em redes de fluxo, por multi-comutação e por multi-impulsão. Estas duas técnicas de automatização, baseadas em condições de não-equilíbrio químico no momento da execução das medições analíticas, resultaram da colaboração estreita entre o seu grupo e o grupo de investigação do Prof. Elias Zagatto da Uni-

versidade de São Paulo, Brasil. Estas técnicas foram disseminadas por outros grupos, encontrando-se agora em utilização corrente para o desenvolvimento de novos métodos de análise em diferentes países.

A sua projeção internacional é significativa, tendo estabelecido colaborações com inúmeras instituições de diversos países, sendo de destacar o Brasil que, por essa razão, lhe atribuiu a grande distinção de ser membro estrangeiro da Academia Brasileira de Ciências desde 2005. Foi ainda agra-

ciado com prémios da Japanese Association for Flow Injection Analysis e da Associação Nacional de Químicos de Espanha.

Tem sido ainda um membro extremamente ativo da Sociedade Portuguesa de Química, membro da Direção da SPQ, Presidente da Divisão de Química Analítica, Presidente da Delegação do Porto da SPQ, tendo participado na organização de diferentes conferências nacionais e internacionais.

António Rangel e Marcela Segundo

ATUALIDADE CIENTÍFICA

LIGANTES CICLOPENTADIENIL QUIRAIS

Modificações químicas que introduzem propriedades quirais a ligantes ciclopentadienil (Cp) possibilitaram que duas equipas de investigação executassem reações de funcionalização C–H, catalisadas por ródio, de modo a sintetizar materiais com um único enantiómero. Este trabalho abre novos caminhos para os químicos na utilização de um dos ligantes mais populares em síntese orgânica com um dos catiões de metais de transição mais úteis para a produção seletiva de enantiómeros bioreativos, algo que até ao momento não se tinha revelado viável.

Os ligantes Cp quirais já foram anteriormente usados em catálise assimétrica envolvendo metais de transição, como o zircónio, que possui amplos sítios de coordenação disponíveis para a ligação do ligante e do reagente. No entanto, a introdução de ligantes Cp quirais em sistemas de metais de transição de grupo mais elevado (entre 8 e 11), como o ródio, tem-se revelado problemática. A dificuldade advém da incapacidade de desenhar ligantes com substituintes que não compitam com os reagentes pelo limitado número de sítios de coordenação do metal e de simultaneamente controlar a orientação dos reagentes de modo a produzir apenas um enantiómero.

Baihua Ye e Nicolai Cramer do Swiss Federal Institute of Technology, em Lausanne, Suíça, ultrapassaram estes problemas ao preparar um catalisador de ródio coordenado por um ligante Cp quiral que exibe um substituinte benzofenona-ciclohexenil simétrico (Science, DOI: 10.1126/science.1226938). A enantioselectividade era obtida através da capacidade do ligante Cp direcionar a abordagem dos reagentes de modo a que se ligassem ao ródio apenas por um dos lados.

Por outro lado, uma equipa liderada por Thomas R. Ward da Universidade de Basileia, na Suíça, e Tomislav Rovis, da Universidade de Colorado State, E.U.A., resolveu o problema de uma maneira diferente. Os investigadores criaram uma enzima artificial ligando biotina a um anel Cp, fixando posteriormente a estrutura ródio-Cp biotinada dentro da proteína estreptavidina.

A equipa desenvolveu igualmente um resíduo de glutamato que introduziu no centro ativo da proteína e que atua em conjunto com o catalisador de ródio de modo a otimizar a eficiência catalítica (Science, DOI: 10.1126/science.1226132). Tal como uma enzima natural, a versão artificial alinha e liga os reagentes de forma a produzir um único enantiómero.

Ambas as equipas testaram os seus novos catalisadores através da junção de benzamidas a alcenos para a formação de enantiómeros R de dihidroisoquinolonas.

A abordagem da enzima artificial de Ward-Rovis “é extremamente inovadora,” afirma Michael E. Kopach, químico da companhia farmacêutica Eli Lilly & Co. e corresponsável do ACS Green Chemistry Institute’s Pharmaceutical Roundtable. No entanto, acrescenta que “a gama de substratos usados e de excessos enantioméricos testados terá de ser alargada para que seja industrialmente viável”. Por outro lado, o catalisador quiral desenhado pelo grupo de Cramer “tem potencial industrial significativo já que a enantioselectividade é elevada, as cargas de catalisador são baixas, e a sua aplicabilidade deverá ser alargada”, finaliza Kopach.

Robert A. Singer, químico da Pfizer, comenta que “ambas as abordagens para a obtenção da enantioselectividade são complementares e deverão ser úteis na preparação de novas estruturas em química medicinal”.

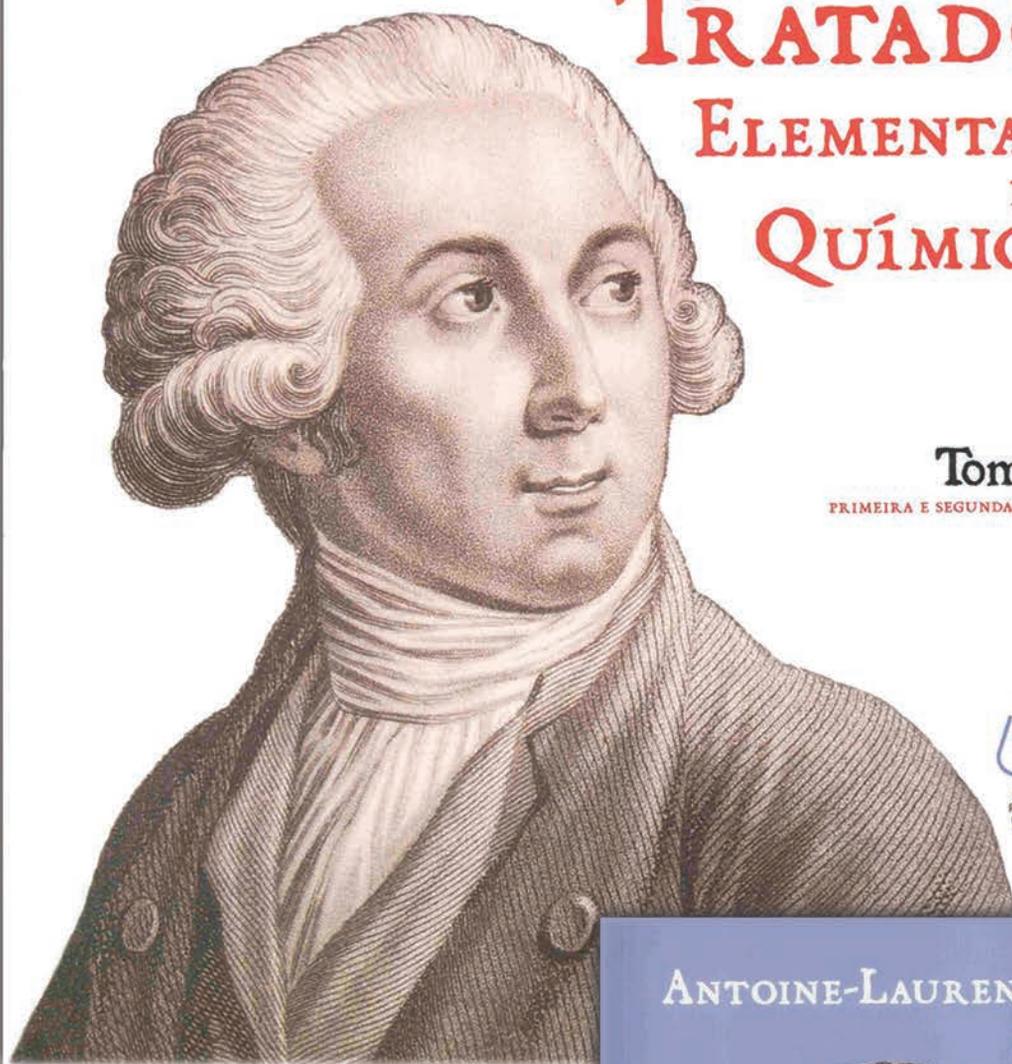
Acrescenta ainda que “os métodos são particularmente atraentes, já que operam em condições suaves, sendo assim aplicáveis em sistemas onde os reagentes possuam grupos funcionais sensíveis. Adicionalmente, melhorias futuras permitiriam adaptar as estratégias para a utilização de metais mais abundantes e económicos do que o ródio”.

(adaptado do artigo de 26/10/2012 de Stephen K. Ritter: Cyclopentadienyl Ligands Go Chiral, <http://cen.acs.org/articles/90/i44/Cyclopentadienyl-Ligands-Chiral.html>)

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

ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

TRATADO
ELEMENTAR
DE
QUÍMICA



Tomo I

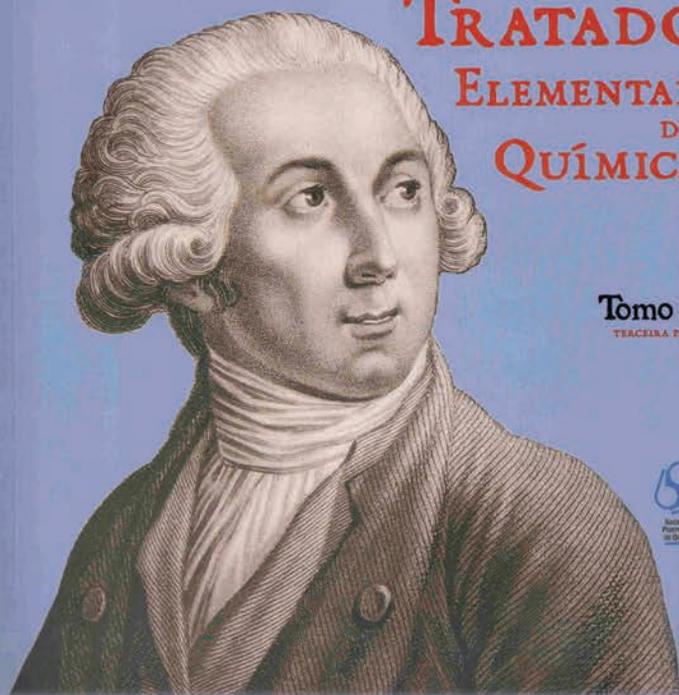
PRIMEIRA E SEGUNDA PARTES



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

TRATADO
ELEMENTAR
DE
QUÍMICA



Tomo II

TERCEIRA PARTE



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA

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

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

TOMO I e II

P.V.P.: 32 euros

Sócios da SPQ: 20 euros

ENCOMENDAS À SPQ

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

Telefone: 21 793 46 37

email: sede@spq.pt

FULERENOS COMO SENSORES FLUORESCENTES DE TEMPERATURA E DE OXIGÉNIO*

MÁRIO N. BERBERAN E SANTOS¹ E CARLOS BALEIZÃO²

Os fulerenos, em especial o C_{70} e derivados, possuem um tipo raro e invulgarmente intenso de fluorescência, a fluorescência retardada por activação térmica (FRAT). Descrevem-se neste texto alguns dos aspectos fundamentais da FRAT e das suas aplicações em sensores de temperatura e de oxigénio baseados em fulerenos. Quase três décadas após o seu descobrimento, estas moléculas de carbono continuam a proporcionar surpresas.

INTRODUÇÃO

A descoberta dos fulerenos, em 1985, por Kroto, Smalley e colaboradores [1], quando procuravam obter cadeias lineares de carbono por vaporização de grafite com um laser, seguida da invenção de um método para a sua produção à escala macroscópica em 1990, por Krätschmer e Huffman [2], deu início a um novo e fértil campo de investigação, que suscitou desde logo grande interesse e expectativa na comunidade científica. Uma década depois, em 1996, Kroto, Curl e Smalley receberam o Prémio Nobel de Química pela preparação e identificação da terceira forma alotrópica do carbono, entretanto estudada exaustivamente. Seguiram-se a esta os nanotubos e o grafeno (que levou a outro Nobel, desta feita de Física, em 2010). Os fulerenos têm sido aplicados em conversão de energia solar, em materiais, em óptica e na electrónica [3]. O mais comum, de longe, é o C_{60} , no qual se apoia quase toda a química dos fulerenos, vindo depois o C_{70} e o C_{76} (Figura 1). Estes três fulerenos podem ser vistos, quer como grandes moléculas de carbono esferoidais, quer como nanopartículas (o seu diâmetro hidrodinâmico é de aproximadamente 1 nm) com composição e forma bem definidas.

A reactividade dos fulerenos levou ao desenvolvimento de diversas re-

acções de funcionalização, com produção de derivados que aliam às propriedades intrínsecas dos fulerenos as propriedades das moléculas e grupos funcionais adicionados [4-5]. De entre as diversas reacções utilizadas para este fim, destacam-se as reacções de Prato [6] e de Bingel [7]. É interessante referir que a síntese química dos fulerenos em condições suaves não foi conseguida até hoje, sendo estes obtidos comercialmente, quer pelo método de Krätschmer e Huffman (aperfeiçoado por Smalley), que consiste numa descarga eléctrica entre eléctrodos de grafite, em atmosfera inerte, que produz uma mistura de fulerenos (dominada pelo C_{60}) e outros produtos sob a forma de fuligem, quer por reacções de combustão incompleta de hidrocarbonetos que, em condições apropriadas, dão origem a uma fuligem rica (até 20 %

em fulerenos. Em ambos os casos estes são depois separados por cromatografia. Embora os fulerenos sejam raríssimos no ambiente terrestre, descobriram-se há pouco tempo grandes quantidades dos mesmos em vários pontos da nossa galáxia, em particular numa nebulosa planetária a 6000 anos-luz da Terra (totalizando aí cerca de 1,5 massas lunares) [8].

As propriedades fotofísicas e fotoquímicas dos fulerenos [9-10] resultam do elevado número de electrões π deslocalizados, bem como da grande simetria e da curvatura das estruturas. Note-se que, embora haja deslocalização dos electrões π no estado fundamental, as ligações não são todas equivalentes, mantendo quase um carácter duplo e simples alternado, como se observou por difracção de raios-X e, muito recentemente, de for-

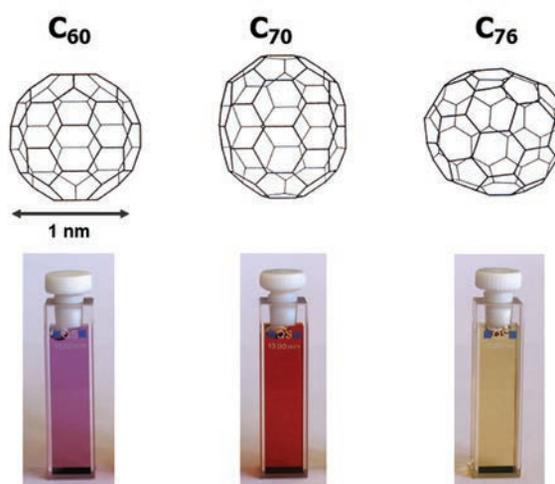


Figura 1 – Da esquerda para a direita: soluções em tolueno dos fulerenos C_{60} , C_{70} e C_{76} . O primeiro, e mais abundante de todos os fulerenos (por razões cinéticas), produz soluções violáceas. Quanto à cor das soluções de C_{70} , primeiramente obtidas por Roger Taylor e colaboradores em 1990, foi por este britânico designada “port-wine red”. Finalmente, o C_{76} , primeiro fulereno quiral, e o único não fluorescente dos três, produz soluções acastanhadas

* Por decisão dos autores, e concordância da equipa editorial do QUÍMICA, este artigo não segue o novo Acordo Ortográfico

^{1,2} Centro de Química-Física Molecular e Instituto de Nanociências e Nanotecnologia, Instituto Superior Técnico, 1049-001 Lisboa, Portugal

¹ E-mail: berberan@ist.utl.pt

² E-mail: carlos.baleizao@ist.utl.pt

ma ainda mais directa, por microscopia de força atómica [11]. Os fulerenos comportam-se como políenos, e não como moléculas aromáticas, no que diz respeito à sua reactividade.

Uma das propriedades fotofísicas mais característica e interessante (para nós) dos fulerenos C_{60} , C_{70} e derivados, é a existência de um segundo mecanismo de fluorescência, a fluorescência retardada por activação térmica (FRAT, em inglês TADF, thermally activated delayed fluorescence) [12,13]. A FRAT é observada em muito poucas moléculas (Figura 2) e normalmente tem uma intensidade muito fraca, mas é extremamente intensa nos fulerenos, especialmente no C_{70} .

Neste artigo iremos precisamente tratar da FRAT dos fulerenos e da sua aplicação em sensores fluorescentes de temperatura e oxigénio.

A FLUORESCÊNCIA RETARDADA NOS FULERENOS E A APLICAÇÃO DESTES COMO SENSORES FLUORESCENTES

A fluorescência molecular pode ocorrer por dois mecanismos unimoleculares diferentes: fluorescência imediata (FI, ou PF, do inglês prompt fluorescence) ou fluorescência retardada por activação térmica, FRAT [12]. No mecanismo de FI, a emissão ocorre após absorção $S_n \leftarrow S_0$ e relaxação do estado excitado para S_1 . Já o mecanismo FRAT ocorre via estado tripleto. Após excitação e atingido o estado S_1 , ocorre um cruzamento inter-sistemas para o estado tripleto (T_1 ou superior), seguido de um segundo cruzamento inter-sistemas de T_1 para S_1 , e finalmente emissão de fluorescência (Figura 3). O ciclo $S_1 \rightarrow T_1 \rightarrow S_1$ pode mesmo repetir-se muitas vezes antes de emissão de fluorescência, como veremos. Mas a FRAT só tem expres-

são quando o rendimento quântico de formação de tripleto (Φ_T) e o rendimento quântico de formação de singuleto (Φ_S) são ambos elevados [13]. Isto implica que a diferença energética entre os estados S_1 e T_1 (ΔE_{ST}) seja pequena e que o tempo de vida do T_1 seja longo. Para a generalidade dos fluoróforos, a FRAT é muito mais fraca que a FI e, embora já se conheça este fenómeno há muitos anos, continua a ser bastante raro [14]. A FRAT foi de facto apenas observada em alguns derivados do xanteno [15-17], cetonas [18-19] e tionas [20-21] aromáticas, numa porfirina de zinco [22], num derivado do imidazole [23], em alguns hidrocarbonetos aromáticos [24-25], em fulerenos [13, 26-30] e num complexo de cobre [31] (Figura 2).

O fulereno C_{70} tem um conjunto de propriedades fotofísicas quase único, e que é extremamente favorável

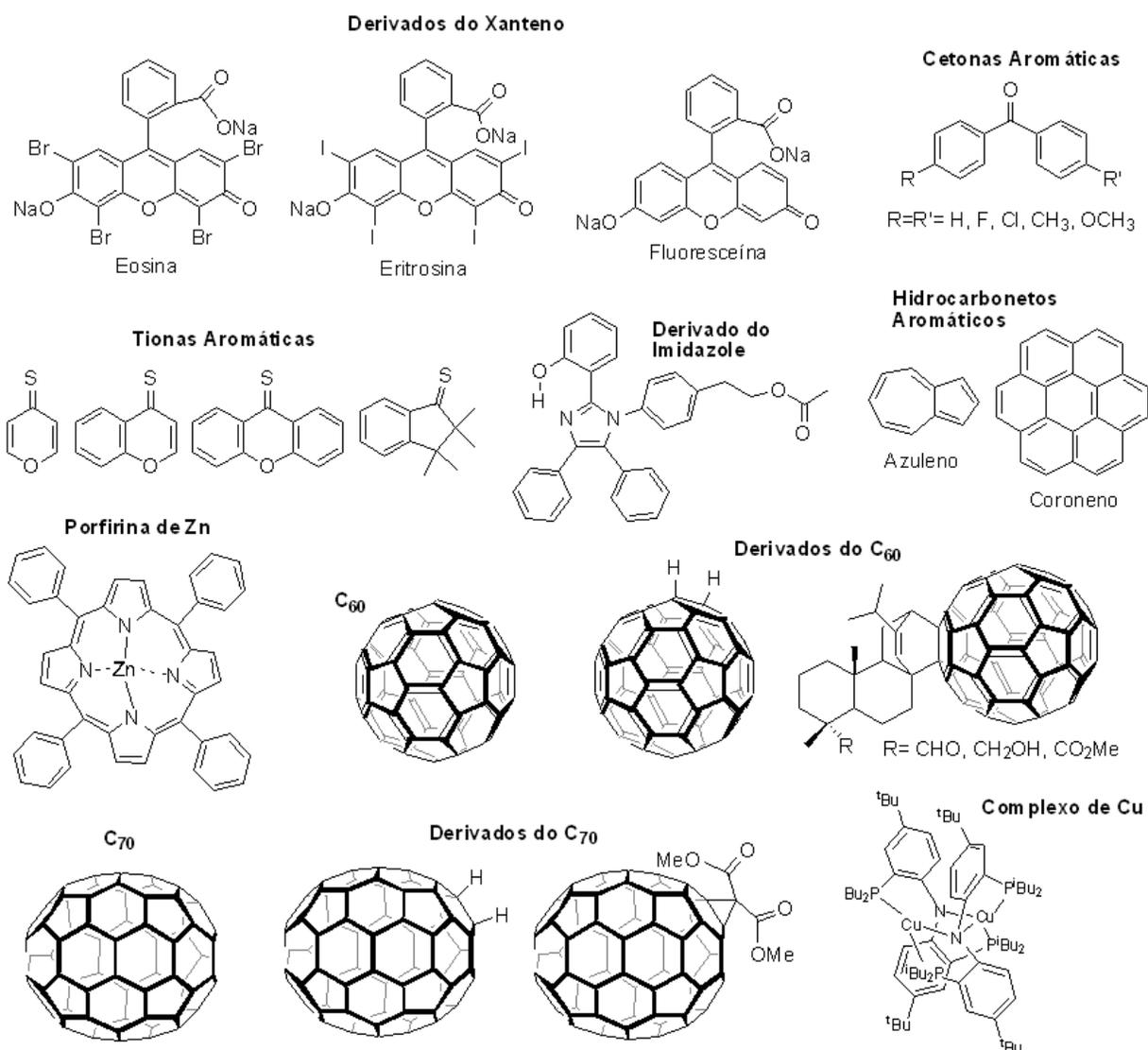


Figura 2 – Estruturas de moléculas com FRAT

à FRAT: Φ_T muito próximo de 1 [32], ΔE_{ST} reduzida [33], e tempo de vida de fosforescência elevado, na escala de dezenas de milissegundos [34]. Por esta razão se observa no C_{70} uma FRAT involuntariamente forte [13]. Outros fulerenos, como o C_{60} [26] e alguns dos seus derivados [27-28], bem como derivados do C_{70} [29-30], também têm FRAT, mas menos intensa do que a do C_{70} . Por exemplo, o rendimento quântico de fluorescência (Φ_F) global (FRAT + FI) do fulereno C_{60} pode ser até 10 vezes superior quando comparado com o rendimento quântico contabilizando exclusivamente a FI, Φ_F^0 [24], mas para o fulereno C_{70} (quando enriquecido no isótopo C-13, ver adiante) este quociente pode atingir 170 [35]. Demonstra-se [30] que $\frac{\Phi_F}{\Phi_F^0} - 1$ é precisamente igual ao número médio de ciclos $S_1 \rightarrow T_1 \rightarrow S_1$, isto é, no caso do C_{70} podem ocorrer, em média, até cerca de 170 ciclos completos, antes que se dê a emissão de fluorescência. Demonstra-se, ainda, que a intensificação máxima possível devida à FRAT é dada por [35] $\frac{\Phi_F^{\max}}{\Phi_F^0} = \frac{1}{1 - \Phi_T}$, isto é, devido ao retor-

no frequente a S_1 , a FRAT anula completamente o canal de desactivação de S_1 representado pelo cruzamento intersistemas (processo $S_1 \rightarrow T_1$).

A FRAT só é significativa na ausência de oxigénio ou, quando muito, na presença de concentrações residuais de O_2 , caso contrário o estado tripleto sofre extinção e a FRAT deixa de ocorrer. Outro parâmetro chave da FRAT é a temperatura, pois o número de ciclos $S_1 \rightarrow T_1 \rightarrow S_1$ aumenta com o aumento de temperatura.

A FRAT que se observa nos fulerenos, e em especial no C_{70} , em conjunto com a estabilidade térmica e fotoquímica destas moléculas [3], permitiu-nos antever o desenvolvimento de sensores fluorescentes com base em fulerenos, em especial para concentrações residuais de oxigénio ou temperaturas relativamente elevadas (acima dos 70 °C) (Figura 4).

Os sensores ópticos usando moléculas fluorescentes são obtidos pela incorporação destas em materiais sólidos (normalmente polímeros), que têm de cumprir várias condições [36]: (i) o suporte terá de ser um bom sol-

vente para a molécula fluorescente, evitando-se a sua agregação (e consequentes possíveis alterações nas propriedades fotofísicas); (ii) a permeabilidade ao oxigénio terá de ser controlada. Dependendo da aplicação, será desejável uma permeabilidade elevada ou reduzida.

Os fulerenos não modificados (C_{60} , C_{70} , etc.) têm uma baixa solubilidade na maioria dos solventes orgânicos, sendo solúveis em hidrocarbonetos alifáticos e, principalmente, em hidrocarbonetos aromáticos [37]. Este comportamento limita a escolha de possíveis polímeros que podem ser compatibilizados com fulerenos. A escolha recairá em polímeros com elevada permeabilidade ao oxigénio se a aplicação for a medição de oxigénio residual, ou em polímeros com reduzida permeabilidade ao oxigénio se a aplicação for a medição de temperatura (Figura 4).

De entre os diversos tipos de sensores ópticos, os fluorescentes estão entre os mais sensíveis e versáteis [38]. Esta classe de sensores pode ser excitada e a emissão medida opticamente, não sendo necessário qualquer contacto físico, com óbvia vantagem em aplicações onde o ruído electromagnético é forte ou em que um contacto eléctrico seja indesejável. Os sensores fluorescentes têm ainda um tempo de resposta muito curto, são reversíveis, e a resolução espacial pode ir da macroescala (tintas fluorescentes) à nanoescala (microscopia de fluorescência).

FULERENOS EM SENSORES FLUORESCENTES DE TEMPERATURA

Os sensores fluorescentes de temperatura mais comuns têm como fluoróforos complexos inorgânicos ou moléculas orgânicas [39-40], cuja intensidade de fluorescência decresce com o aumento de temperatura devido a um processo de extinção activado termicamente [41], com um limite superior de temperatura de trabalho da ordem dos 70 °C. A sua utilização para temperaturas superiores é normalmente inviável, sendo necessárias novas estratégias para ultrapassar esta lacuna. Existem ainda alguns sólidos inorgânicos luminescentes que permitem medir temperaturas elevadas, mas os

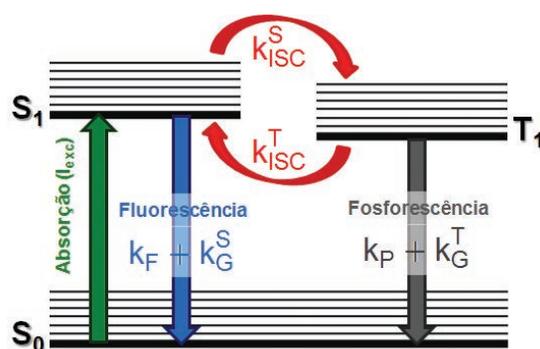


Figura 3 – Esquema cinético simplificado para a FRAT: I_{exc} é a intensidade de excitação, k_F e k_P são as constantes cinéticas radiativas para a fluorescência e a fosforescência, k_G^S e k_G^T são as constantes cinéticas não radiativas para a relaxação para o estado fundamental (conversão interna a partir de S_1 e cruzamento inter-sistemas para T_1 , respectivamente) e k_{ISC}^S e k_{ISC}^T são as constantes cinéticas de cruzamento inter-sistemas para a conversão singuleto-triplete e tripleto-singuleto, respectivamente

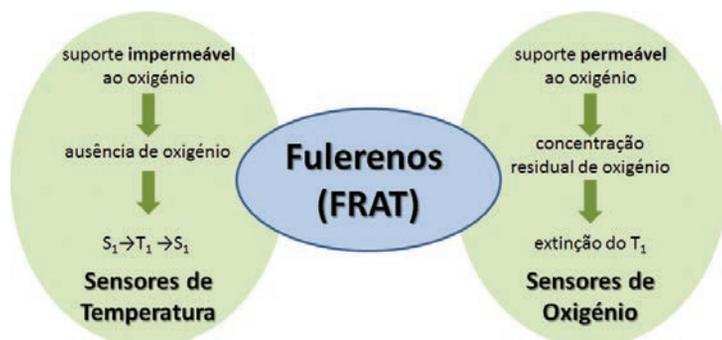


Figura 4 – Requisitos para o desenvolvimento de sensores fluorescentes com base em fulerenos

seus tempos de vida são relativamente curtos e as sensibilidades e intensidades raramente são satisfatórias. Em [42] discutem-se alguns destes aspectos, bem como sistemas com potencial para medição da temperatura à escala dos micrómetros.

A estabilidade térmica e as propriedades fotofísicas (especialmente a FRAT) dos fulerenos sugerem que estas moléculas possam ser usadas em sensores fluorescentes de temperatura, mesmo para valores superiores a 70 °C.

A descoberta da FRAT no fulereno C_{70} foi o primeiro passo para o desenvolvimento de sensores fluorescentes de temperatura com base em fulerenos [13]. O estudo foi realizado numa solução de parafina líquida, e a remoção do oxigénio levou a um aumento de 20 vezes da intensidade de fluorescência, à temperatura ambiente. Ao subir a temperatura a intensidade de fluorescência também cresceu, e a 70 °C o aumento foi de 50 vezes relativamente à temperatura ambiente na presença de oxigénio (Figura 5).

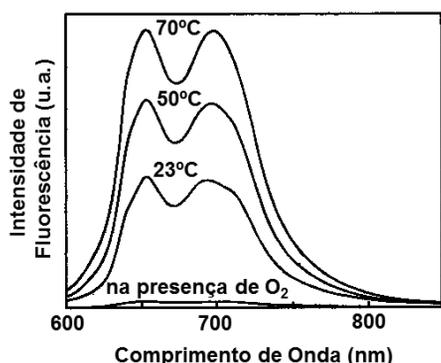


Figura 5 – Variação da intensidade de fluorescência com a temperatura para uma solução de C_{70} em parafina. A emissão da solução na presença de oxigénio é independente da temperatura, enquanto que na ausência de oxigénio se observa um aumento progressivo com a temperatura. Adaptado de [13] e reproduzido com a permissão da American Chemical Society

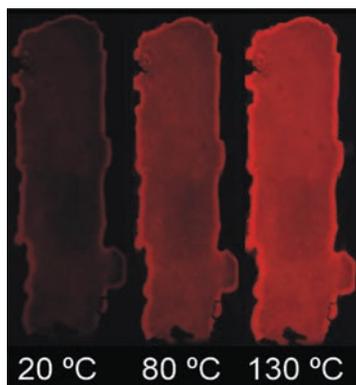


Figura 6 – Fotografias da fluorescência (visível a olho nu) do C_{70} num filme de PtBMA, na ausência de oxigénio. Reproduzido de [43] com a permissão da Wiley-VCH

O efeito foi reversível até 70 °C, mas acima dessa temperatura a reversibilidade desapareceu (degradação da parafina). Outro problema deste sistema era a sua natureza líquida, o que limitava as aplicações.

O passo óbvio foi incorporar o fulereno C_{70} numa matriz sólida, aumentando desta forma a gama de temperaturas e o leque de possíveis aplicações. A chave para dispersar de forma eficiente o fulereno C_{70} está na escolha de um material que possa ser dissolvido no mesmo solvente que o fulereno. Existem vários polímeros nessas condições. Foram seleccionados os seguintes polímeros solúveis em tolueno (bom solvente para o fulereno C_{70}): poliestireno (PS), poli(metacrilato de *tert*-butilo) (PtBMA) e poli(1-vinilo naftaleno) (P1VN) [43]. Os filmes foram estudados em vácuo e observou-se o mesmo efeito já descrito para a solução de parafina (Figura 6). O aumento de temperatura, até mais de 100 °C, levou a um aumento da intensidade de fluorescência, sendo o sistema reversível. Adicionou-se um padrão interno (perileno) para calibrar o sistema devi-

do às possíveis variações da composição do filme. O desempenho do sistema C_{70} -PtBMA foi comparado com um sensor de fluorescência comercial, o complexo de ruténio com fenantrolina ($Ru(phen)_3$) disperso em poliácridonitrilo (PAN) (Figura 7). Para temperaturas acima de 70 °C, o C_{70} -PtBMA é preferível ao $Ru(phen)_3$ -PAN, pois a FRAT leva a um aumento da intensidade com a temperatura. O sistema obtido é assim uma opção válida para temperaturas acima dos 70 °C, sendo o limite superior essencialmente condicionado pela resistência térmica da matriz.

A utilização do sistema anterior está no entanto limitada pelo facto de ser necessário trabalhar sob vácuo (ou em atmosfera inerte), de forma a eliminar o efeito do oxigénio sobre o estado tripleto. A incorporação do fulereno C_{70} num material impermeável ao oxigénio tornaria o novo sensor mais versátil, mas a fraca solubilidade dos fulerenos dificulta este procedimento. Uma possibilidade é a encapsulação em nanopartículas de polímero, que posteriormente podem ser incorporadas em outros materiais, com a possibilidade de modificar a superfície das nanopartículas para melhorar a compatibilização. Utilizou-se para este fim polimerização por miniemulsão, permitindo o encapsulamento do fulereno C_{70} em nanopartículas de poliestireno reticulado (com diâmetros de 60 nm e 190 nm) [44]. As nanopartículas foram posteriormente misturadas com PAN, um polímero virtualmente impermeável ao oxigénio [45] e, após compressão e aquecimento numa prensa hidráulica, foi possível obter filmes macroscopicamente homogêneos. As propriedades de fluorescência destes filmes foram estudadas na presença e na ausência de oxigénio. Verificou-se que o tempo de vida não sofre qualquer alteração

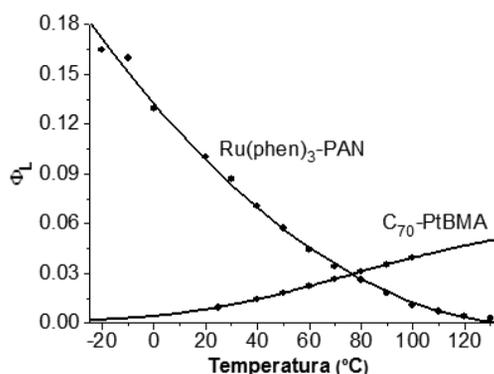


Figura 7 – Variação do rendimento quântico de luminescência (Φ_l) com a temperatura para $Ru(phen)_3$ -PAN e C_{70} -PtBMA. Adaptado de [43] e reproduzido com a permissão da Wiley-VCH

quando o filme é exposto ao ar, ou seja, a dispersão das nanopartículas em PAN impede a extinção da fluorescência retardada do C_{70} pelo oxigênio. Os tempos de vida medidos são idênticos aos observados para o C_{70} em PS na ausência de oxigênio (Figura 8). Uma das grandes vantagens do sensor de C_{70} é a escala temporal dos seus tempos de vida (milissegundos), muito superiores aos do sensor comercial, $Ru(phen)_3$ -PAN (microsegundos), o que simplifica a aparelhagem de medição necessária. A outra vantagem, já mencionada, é a maior intensidade do sinal a temperaturas elevadas, visto que a intensidade de fluorescência aumenta com a temperatura.

FULERENOS EM SENSORES FLUORESCENTES DE OXIGÊNIO

A determinação de concentrações residuais de oxigênio pode ser realizada, quer por um método electroquímico, quer por um método óptico. O método electroquímico tem como base os eléctrodos de Clark [46] e é muito sensível, mas tem alguns problemas operacionais: é invasivo, é impraticável em medições simultâneas em muitos pontos de um sistema, e é de miniaturização difícil. Os sensores ópticos de oxigênio baseados nas propriedades fotofísicas de moléculas orgânicas ou complexos inorgânicos [47-48] ultrapassam as dificuldades operacionais dos sensores electroquímicos, e têm limites de detecção da ordem das partes-por-milhão em volume (ppmv). Para este fim, as moléculas orgânicas e os complexos inorgânicos são dispersos em polímeros com elevada permeabilidade ao oxigênio e com boa estabilidade fotoquímica e térmica.

A elevada sensibilidade conferida pela FRAT ao fulereno C_{70} levou-nos a explorar a possibilidade de utilizar o C_{70} como sensor fluorescente de oxigênio para concentrações residuais em fase gasosa. Para os materiais utilizados como suporte, a escolha recaiu numa sílica modificada com grupos fenilo (Ormosil, OS) e numa celulose funcionalizada com grupos etilo (EC) [49]. Ambos os polímeros são solúveis em tolueno, são estáveis termicamente e têm permeabilidades ao oxigênio muito elevadas [45]. A variação do tempo de vida de fluorescência com a concentração de oxigênio é extrema, observando-se uma redução de aproximadamente 50-60% do tempo de vida para 50 ppmv de O_2 (Figura 9). Os valores de sensibilidade determinados para estes sensores variaram entre 160 e 540 partes-por-bilião em volume (ppbv), uma ordem de grandeza inferior aos valores de sensibilidade para os melhores sensores fluorescentes de oxigênio anteriormente conhecidos [47-49]. No entanto, todos os sensores fluorescentes de oxigênio têm uma resposta que depende da temperatura. Na Figura 9 vê-se que, mesmo na ausência de oxigênio, o tempo de vida diminui com o aumento de temperatura. Esta dependência pode ser tida em conta com a introdução de um sensor de temperatura. O desenvolvimento de sensores múltiplos tem crescido nos últimos anos, pois permite a partir de um ponto único obter informação sobre vários parâmetros químicos ou físicos [50]. Os sensores de oxigênio atrás descritos (C_{70} em OS e EC) foram incorporados em sensores duplos contendo um sensor de temperatura ($Ru(phen)_3$ -PAN) [51]. Este tem de ser insensível ao oxigênio, e após calibração dos dois

sensores, é possível chegar a uma expressão empírica que permite o cálculo da concentração de oxigênio, tendo em linha de conta a temperatura de trabalho. A gama de temperaturas (0-120 °C) destes sensores é a mais alta até agora descrita, sendo as concentrações de oxigênio (0-0.005%) as mais baixas da literatura.

Recentemente, descrevemos a influência da substituição isotópica (^{12}C por ^{13}C) nas propriedades fotofísicas do fulereno C_{70} , especialmente na FRAT e na fosforescência [35]. Trata-se da primeira observação de um efeito isotópico de carbono na fluorescência (e fosforescência) de uma molécula. O efeito, ainda em estudo, e que é não só de massa, mas também de spin nuclear (acoplamento hiperfino), faz com que o $^{13}C_{70}$ seja o mais fluorescente de todos os fulerenos (rendimento quântico de fluorescência máximo estimado de 9%), com propriedades de FRAT bastante diferentes do seu isotópologo $^{12}C_{70}$ [35]. De facto, o fulereno $^{13}C_{70}$ tem tempos de vida de FRAT e de fosforescência duplos dos do $^{12}C_{70}$, o que o torna extremamente sensível a concentrações residuais de oxigênio. A incorporação do fulereno $^{13}C_{70}$ em filmes poliméricos de OS, EC e PS permitiu modular a sensibilidade do sensor (na ordem dos ppbv) devido às diferentes permeabilidades dos polímeros, tornando possível a escolha do suporte de acordo com os requisitos da aplicação [52].

CONCLUSÕES

Neste artigo discutiu-se a fluorescência retardada por activação térmica (FRAT) observada nos fulerenos, bem como a sua aplicação em sensores fluorescentes de temperatura e oxigênio. Estes sensores têm desempenhos adequados para aplicações com condições de temperatura elevada (> 70 °C) e baixas concentrações de oxigênio (< 1 ppmv). Não obstante o trabalho já realizado, existem ainda possibilidades de inovação. Um exemplo é o desenvolvimento de materiais mais versáteis em termos de manuseamento e processamento, com permeabilidades ao oxigênio ultra-reduzidas. Por outro lado, os sistemas descritos neste artigo têm características adequadas a uma eventual aplicação como sensores de gases raros (por exemplo kriptón e xénon), devido à

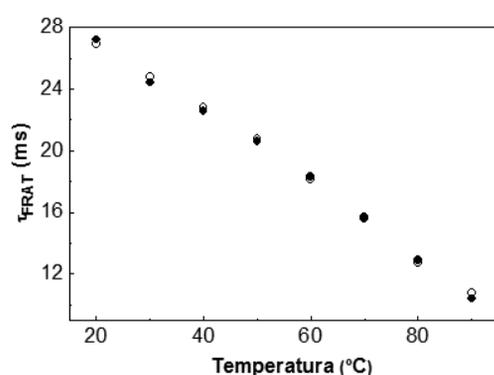


Figura 8 – Variação do tempo de vida de fluorescência (τ_{FRAT}) com a temperatura do filme PS- C_{70} em vácuo (●) e do filme PS- C_{70} /PAN exposto ao ar (○). Adaptado de [44] e reproduzido com a permissão da Royal Society of Chemistry

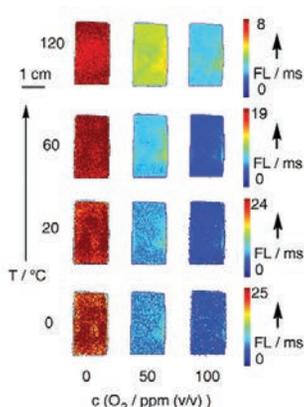


Figura 9 – Variação do tempo de vida de fluorescência (FL) com a concentração de oxigénio a diferentes temperaturas de um filme de EC-C₇₀. As imagens de tempo de vida de fluorescência estão em códigos de cores. Adaptado de [49] e reproduzido com a permissão da Wiley-VCH

sensibilidade dos fulerenos ao efeito de átomo pesado.

AGRADECIMENTOS

À Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT-Portugal) pelo financiamento dos projectos de investigação PTDC/CTM/101627/2008, PTDC/CTM-CER/111590/2009 e PTDC/QUI-QUI/123162/2010, e pelas bolsas SFRH/BPD/14561/2003 e SFRH/BPD/28438/2006. Ao Eng. João Garcia e à Dra. Filipa Salazar, com quem se iniciaram os estudos de FRAT, e a todos os outros *socii laborum* nesta linha de investigação. Ao Prof. José Paulo Farinha e à Mestre Vera Augusto (CQFM-IST) pela colaboração no desenvolvimento das nanopartículas poliméricas. Um agradecimento especial ao Prof. Otto S. Wolfbeis e ao seu grupo (Institute of Analytical Chemistry, Chemo- and Biosensors/Universidade de Regensburg/Alemanha), pela profícua colaboração ao longo dos últimos cinco anos.

REFERÊNCIAS

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley, *Nature* **318** (1985) 162-163.
- [2] W. Krätschmer, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman, *Nature* **347** (1990) 354-358.
- [3] "Fullerenes: Principles and Applications", F. Langa, J.-F. Nierengarten (ed.), RSC, Cambridge, 2007.
- [4] C. Thilgen, F. Diederich, *Chem. Rev.* **106** (2006) 5049-5135.
- [5] J.L. Delgado, N. Martin, P. de la Cruz, F. Langa, *Chem. Soc. Rev.* **40** (2011) 5232-5241.
- [6] M. Maggini, G. Scorrano, M. Prato, *J. Am. Chem. Soc.* **115** (1993) 9798-9799.
- [7] C. Bingel, *Chem. Ber.* **126** (1993) 1957-1959.
- [8] J. Cami, J. Bernard-Salas, E. Peeters, S. E. Malek *Science* **329** (2010) 1180-1182.
- [9] D.M. Guldi, M. Prato, *Acc. Chem. Res.* **33** (2000) 695-703.
- [10] Y.P. Sun, J.E. Riggs, Z. Guo, H.W. Rollins, 'Photoexcited state and electron transfer properties of fullerenes and related materials', in J. Shinar, Z.V. Vardeny, Z.H. Kafafi (ed.), *Optical and Electronic Properties of Fullerenes and Fullerene-Based Materials*, New York: Marcel Dekker (2000) 43-82.
- [11] L. Gross, F. Mohn, N. Moll, B. Schuler, A. Criado, E. Guitián, D. Peña, A. Gourdon, G. Meyer, *Science* **337** (2012) 1326-1329.
- [12] B. Valeur, M.N. Berberan-Santos, *Molecular Fluorescence: Principles and Applications*, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2012.
- [13] M.N. Berberan-Santos, J.M.M. Garcia, *J. Am. Chem. Soc.* **118** (1996) 9391-9394.
- [14] C. Baleizão, M.N. Berberan-Santos, *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **1130** (2008) 224-234.
- [15] C.A. Parker, *Photoluminescence of Solutions*, Elsevier, Amsterdam, 1968.
- [16] S.K. Lam, D. Lo, *Chem. Phys. Lett.* **281** (1997) 35-43.
- [17] R. Duchowicz, M.L. Ferrer, A.U. Acuña, *Photochem. Photobiol.* **68** (1998) 494-501.
- [18] M.W. Wolf, K.D. Legg, R.E. Brown, L.A. Singer, J.H. Parks, *J. Am. Chem. Soc.* **97** (1975) 4490-4497.
- [19] A.M. Turek, G. Krishnamorthy, K. Phipps, J. Satiel, *J. Phys. Chem. A* **106** (2002), 6044-6052.
- [20] A. Maciejewski, M. Szymanski, R.P. Steer, *J. Phys. Chem.* **90** (1986) 6314-6318.
- [21] H. Eisenberger, B. Nickel, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **92** (1996), 733-740.
- [22] S. Yusa, M. Kamachi, Y. Morishima, *Photochem. Photobiol.* **67** (1986) 519-525.
- [23] S. Park, O.H. Kwon, Y.S. Lee, D.J. Jang, S.Y. Park, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 9649-9653.
- [24] J.L. Kropp, W.R. Dawson, *J. Phys. Chem.* **71** (1967) 4499-4506.
- [25] B. Nickel, D. Klemp, *Chem. Phys.* **174** (1993) 297-318. B. Nickel, D. Klemp, *Chem. Phys.* **174** (1993) 319-330.
- [26] F.A. Salazar, A. Fedorov, M.N. Berberan-Santos, *Chem. Phys. Lett.* **271** (1997) 361-366.
- [27] B. Gigante, C. Santos, T. Fonseca, M.J.M. Curto, H. Luftmann, K. Bergander, M.N. Berberan-Santos, *Tetrahedron* **55** (1997), 6175-6182.
- [28] S.M. Anthony, S.M. Bachilo, R.B. Weisman, *J. Phys. Chem. A* **107** (2003) 10674-10679.
- [29] S.M. Bachilo, A.F. Benedetto, R.B. Weisman, J.R. Nossal, W.E. Billups, *J. Phys. Chem. A* **104** (2000) 11265-11269.
- [30] C. Baleizão, M.N. Berberan-Santos, *J. Chem. Phys.* **126** (2007), 204510.
- [31] J.C. Deaton, S.C. Switalski, D.Y. Kondakov, R.H. Young, T.D. Pawlik, D.J. Giesen, S.B. Harkins, A.J.M. Miller, S.F. Mickenberg, J.C. Peters, *J. Am. Chem. Soc.* **132** (2010) 9499-9508.
- [32] J.W. Arbogast, C.S. Foote, *J. Am. Chem. Soc.* **113** (1991) 8886-8889.
- [33] S.M. Argentine, K.T. Kotz, A.H. Francis, *J. Am. Chem. Soc.* **117** (1995) 11762-11767.
- [34] M.R. Wasielewski, M.P. O'Neil, K.R. Lykke, M.J. Pellin, D.M. Gruen, *J. Am. Chem. Soc.* **113** (1991) 2774-2776.
- [35] C. Baleizão, M.N. Berberan-Santos, *ChemPhysChem* **12** (2011) 1247-1250.
- [36] O.S. Wolfbeis, *J. Mater. Chem.* **15** (2005) 2657-2669.
- [37] K.N. Semenov, N.A. Charykov, V.A. Keskinov, A.K. Piartman, A.A. Blokhin, A.A.J. Kopyrin, *Chem. Eng. Data* **55** (2010) 13-36.
- [38] "Optical Sensors for Industrial, Environmental and Clinical Applications", R. Narayanaswamy, O.S. Wolfbeis (eds), Springer, Berlin, 2004.
- [39] J.F. Lou, T.M. Finegan, P. Mohsen, T.A. Hatton, P.E. Laibinis, *Rev. Anal. Chem.* **18** (1999) 235-284.
- [40] S. Uchiyama, A.P. de Silva, K.J. Iwau, *J. Chem. Educ.* **83** (2006) 720-727.
- [41] J.N. Demas, B.A. DeGraff, *Coord. Chem. Rev.* **211** (2001) 317-351.
- [42] C.D.S. Brites, P.P. Lima, N.J.O. Silva, A. Millán, V.S. Amaral, F. Palacio, L.D. Carlos, *Nanoscale* **4** (2012) 4799-4829.
- [43] C. Baleizão, S. Nagl, S.M. Borisov, M. Shaferling, O.S. Wolfbeis, M.N. Berberan-Santos, *Chem. Eur. J.* **13** (2007) 3643-3651.
- [44] V. Augusto, C. Baleizão, M.N. Berberan-Santos, J.P.S. Farinha, *J. Mater. Chem.* **20** (2010) 1192-1197.
- [45] J. Brandrup, E.H. Immergut, E.A. Grulke, "Polymer Handbook", Wiley-VCH Verlag GmbH, New York, 1999.
- [46] R. Ramamoorthy, P.K. Dutta, S.A. Akbar, *J. Mater. Sci.* **38** (2003) 4271-4282.
- [47] X. Wang, H. Chen, Y. Zhao, Y. Chen, X. Wang, *Trends Anal. Chem.* **29** (2010) 319-338.
- [48] X. Wang, O.S. Wolfbeis, *Anal. Chem.* **85** (2013) 487-508.
- [49] S. Nagl, C. Baleizão, S. Borisov, M. Schäferling, O.S. Wolfbeis, M.N. Berberan-Santos, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 2317-2319.
- [50] M.I.J. Stich, L.H. Fischer, O.S. Wolfbeis, *Chem. Soc. Rev.* **39** (2010) 3102-3114.
- [51] C. Baleizão, S. Nagl, M. Schäferling, M.N. Berberan-Santos, O.S. Wolfbeis, *Anal. Chem.* **80** (2008) 6449-6457.
- [52] S. Kochmann, C. Baleizão, M.N. Berberan-Santos, O.S. Wolfbeis, *Anal. Chem.* **85** (2013) 1300-1304.

NANOTUBOS E GRAFENO: OS PRIMOS MAIS JOVENS NA FAMÍLIA DO CARBONO!

LUISA M. PASTRANA-MARTÍNEZ^{1,*}, SERGIO MORALES-TORRES¹,
HELDER T. GOMES^{1,2} E ADRIÁN M.T. SILVA¹

O carbono é o sexto elemento mais abundante do universo, encontrando-se presente tanto na forma orgânica, como em materiais inorgânicos. Além das três formas alotrópicas que ocorrem naturalmente (carbono amorfo, grafite e diamante), podem ser também sintetizadas estruturas de carbono com dimensões nanométricas. Nos últimos anos foram descobertas e caracterizadas novas e interessantes nanoestruturas de carbono, incluindo os nanotubos de carbono e o grafeno. Este breve artigo faz uma resenha sobre os métodos de síntese e caracterização destes dois materiais, aludindo a algumas das suas propriedades mais extraordinárias, bem como às suas aplicações mais recentes e de maior impacto em diversos domínios da ciência e da tecnologia, permitindo, de uma forma simples, introduzir os leitores menos familiarizados com o tema no fascinante mundo destas duas nanoestruturas de carbono.

INTRODUÇÃO

Ao longo das últimas décadas, o crescente interesse pelas pequenas dimensões levou ao aparecimento da nanociência e da nanotecnologia como áreas científicas de extrema importância, onde confluem os vários ramos das Ciências Naturais, como a Química, a Física e a Biologia, e das Ciências Aplicadas, incluindo vários domínios da Engenharia e do Ambiente. Os materiais à escala nanométrica (1-100 nanómetros), apresentam muitas vezes comportamentos diferentes daqueles que são observados à escala macroscópica; os efeitos quânticos tornam-se mais pronunciados, possuem novas propriedades e os elementos químicos exibem padrões distintos de reatividade.

O carbono é um dos elementos mais versáteis da natureza, capaz de se organizar em diferentes arquiteturas à escala nanométrica com um tempo de vida muito curto, originando uma variedade de estruturas estáveis com configurações poliatômicas diferentes, designadas como formas alotrópicas. Estas são estruturas bem diferenciadas, com um ordenamento espacial preciso das orbitais em torno de um átomo central de carbono com distintos tipos de hibridação (sp^3 ,

sp^2 e sp). O número e a natureza das ligações ao átomo de carbono determinam a geometria e as propriedades dos vários alótropos [1]. Até ao início da década de 1920, as únicas estruturas organizadas conhecidas de carbono eram o diamante (hibridização sp^3) e a grafite (hibridização sp^2). Décadas mais tarde, o desenvolvimento de novos equipamentos de caracterização (como espectroscópios e microscópios eletrónicos) e o constante interesse na investigação das cadeias carbonadas, levaram à identificação de novas formas alotrópicas do carbono com hibridização do tipo sp^2 . Entre elas contam-se os fulerenos (C_{60}), descobertos em 1985 por Robert F. Curl Jr., Sir Harold Kroto e Richard E. Smalley [2] (prémios Nobel da Química em 1996), os nanotubos de carbono (a sigla CNT do anglo-saxónico *carbon nanotube* é geralmente utilizada), observados em 1991 por Sumio Iijima [3], e o grafeno, isolado e identificado em 2004 [4] por Andre Geim e Konstantin Novoselov (prémio Nobel da Física em 2010). É hoje aceite que todas essas descobertas representam importantes marcos no desenvolvimento da nanociência e da nanotecnologia [5].

O carbono sp^2 pode encontrar-se na forma de *quantum dots*, ou como fulerenos (Figura 1a) e *nanocebolas* (Figura 1b), todos eles com dimensionalidade 0-D; na forma de fios quânticos (1-D), isto é, materiais com confinamento quântico unidimensional, como os nanotubos de carbono (Figura 1c)

e as nanofitas de grafeno (Figura 1i); ou ainda, apresentar-se em confinamento quântico bidimensional, ou seja, os eletrões podem mover-se em duas direções (2-D), como no grafeno (Figura 1f) ou em superfícies *Haecelkite* (Figura 1h). Além das estruturas em 0-D, 1-D e 2-D, o carbono sp^2 pode formar estruturas tridimensionais (3D), como nas redes de nanotubos (Figura 1o) e nos cristais *Schwarzite* (Figura 1m). Em particular, este artigo tem como objetivo descrever algumas das propriedades de duas formas alotrópicas do carbono, os nanotubos de carbono e o grafeno, bem como referir alguns dos métodos de síntese e algumas aplicações possíveis destes dois materiais.

NANOTUBOS DE CARBONO

Os nanotubos de carbono são nanoestruturas únicas, com propriedades eletrónicas e mecânicas notáveis, algumas decorrentes da sua estreita relação com o grafeno, outras do seu aspecto unidimensional. Do ponto de vista estrutural, os nanotubos de carbono dividem-se em nanotubos de carbono de parede simples (SWCNTs, *single-walled carbon nanotubes*), que podem ser considerados como uma única folha de grafeno enrolada sobre si mesma para formar um tubo cilíndrico, e os nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNTs, *multi-walled carbon nanotubes*), que consistem num conjunto de nanotubos concêntricos estabilizados por forças de van der Waals [6, 7].

¹ LCM – Laboratório de Catálise e Materiais – Laboratório Associado LSRE/LCM, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto

² Escola Superior de Tecnologia e Gestão, Instituto Politécnico de Bragança

* E-mail: lpastrana@fe.up.pt

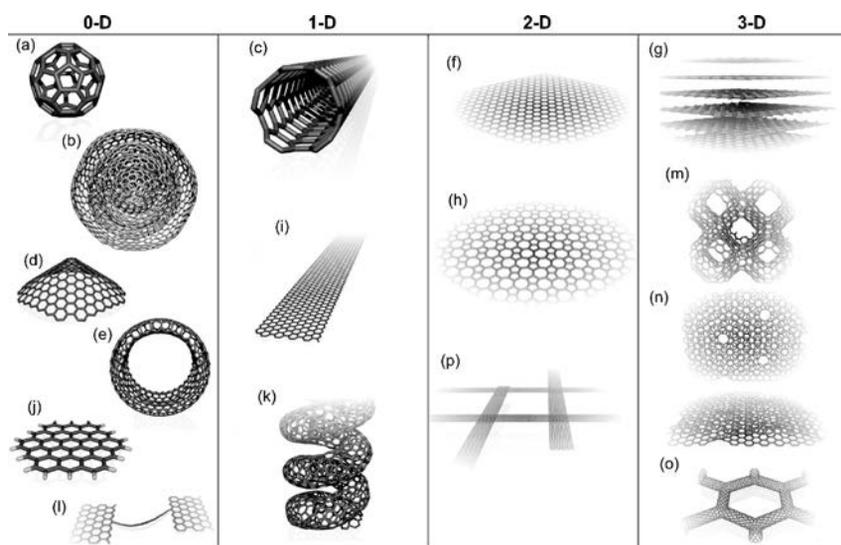


Figura 1 – Modelos moleculares dos diferentes tipos de nanoestruturas de carbono hibridizado sp^2 em 0-D, 1-D, 2-D e 3-D: (a) fullerenos (C_{60}), (b) *nanobolas*, (c) nanotubos de carbono, (d) nanocones, (e) nanotoroides, (f) grafeno, (g) cristais de grafite 3D, (h) superfície *Haeckelite*, (i) nanofitas de grafeno, (j) *clusters* de grafeno, (k) nanotubos de carbono helicoidal, (l) cadeias curtas de carbono, (m) cristais *Schwarzite* 3D, (n) nano-espuma de carbono, (o) rede de nanotubos 3D e (p) rede de nanofitas 2D. Reproduzido com permissão de [5]. Copyright (2010) Elsevier

Em 1976, Endo e colaboradores foram, provavelmente, os primeiros investigadores a reportar a existência dos nanotubos de carbono, utilizando microscopia eletrônica de alta resolução, quando estudavam a produção de fibras de carbono através da pirólise de benzeno e ferroceno a 1000°C [8]. Apesar destas investigações, o interesse nos nanotubos de carbono só se estabelece realmente após a descoberta de Sumio Iijima em 1991 [3], que confirma a estrutura dos nanotubos de carbono de paredes múltiplas. Nas experiências de descarga com um arco elétrico, Iijima observou a formação de fibras de carbono moleculares, com formas cilíndricas e fechadas nas extremidades por seis anéis pentagonais. Utilizando a técnica de microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução (HRTEM, *High-resolution transmission electron microscopy*), confirma que as tais fibras eram constituídas por estruturas tubulares concêntricas, com comprimentos da ordem de micrómetros e diâmetros da ordem de poucos nanômetros (Figura 2). Um par de anos mais tarde, em 1993, o grupo de Iijima [9] e o grupo do Bethune [10] reportaram a síntese de nanotubos de carbono de parede simples, após experiências de descarga com um arco elétrico nas quais os ânodos utilizados eram de carbono contendo pequenas quantidades de metais de transição.

Estrutura e propriedades

A estrutura dos nanotubos de carbono de parede simples é determinada pela forma como estes se fecham sobre si mesmos na rede hexagonal de grafeno. Estes nanotubos podem apresentar três arranjos distintos (Figura 3), designados como “cadeira de braços” (*armchair*), zigue-zague e quiral [11].

Estes arranjos apresentam propriedades de condução elétrica diferentes, que resultam nas propriedades eletrônicas excepcionais dos nanotubos de carbono de parede simples. Todos os nanotubos de carbono do tipo *armchair* são condutores, enquanto que os do tipo zigue-zague e quiral podem ser condutores ou semicondutores.

Outra característica interessante relacionada com a condução de corrente nos nanotubos de carbono advém das suas estruturas quasi-unidimensionais. Isso faz com que o transporte eletrônico nos nanotubos metálicos (tanto de parede simples, como de paredes múltiplas) ocorra sem dispersão, o que permite a condução de corrente através do nanotubo sem que exista aquecimento [12]. Do ponto de vista das investigações teóricas, os nanotubos de carbono de parede simples são mais adequados à modelação computacional do que os de paredes múltiplas, devido à maior facilidade

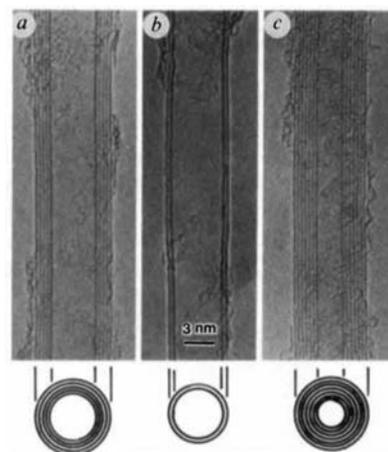


Figura 2 – Micrografias dos primeiros nanotubos de carbono de paredes múltiplas observados por Iijima em 1991, utilizando microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução: tubos com (a) 5, (b) 2 e (c) 7 paredes. Reproduzido com permissão de [3]. Copyright (1991) Nature Publishing Group

na descrição estrutural dos primeiros. Por outro lado, os de paredes múltiplas são sintetizados com maior facilidade e com menor custo do que os de parede simples.

Métodos de síntese

Desde a sua descoberta que os métodos de síntese dos nanotubos de carbono têm sido continuamente otimizados no sentido de se obterem nanotubos puros em quantidades suficientes, tanto para estudos fundamentais, como aplicados. As principais técnicas de síntese podem ser divididas basicamente em: (i) métodos a altas temperaturas, que incluem descarga por arco elétrico [3, 10] (como já referido, Iijima produziu os primeiros nanotubos de carbono de paredes múltiplas por esse método) e ablação por laser [13, 14]; e (ii) métodos a temperaturas moderadas, onde se inclui a deposição química em fase vapor assistida por um catalisador [15, 16]. Este último tem sido amplamente difundido e otimizado, permitindo mesmo a produção em grande escala [17].

Os nanotubos de carbono são geralmente insolúveis na maioria dos líquidos, tais como a água, resinas poliméricas e em quase todos os solventes [18]. Para facilitar e uniformizar a dispersão dos nanotubos em líquidos, podem incorporar-se grupos funcionais ou moléculas polares nas paredes (Figura 4) sem alterar significativamente as suas propriedades

[19-21]. A funcionalização pode ser não-covalente (funcionalização física) ou covalente (funcionalização química). A funcionalização não-covalente de nanotubos baseia-se na utilização de surfactantes capazes de tornar este material “solúvel” em água [18]. Esse processo resulta de interações fracas do tipo van der Waals e interações do tipo π - π . Por outro lado, a funcionalização covalente baseia-se no estabelecimento de ligações covalentes de entidades funcionais às estruturas dos nanotubos de carbono, que podem ocorrer nas extremidades ou nas paredes dos tubos [22, 23]. A funcionalização em defeitos estruturais ocorre por meio de transformações químicas nos defeitos existentes no nanotubo [24].

Outro caso especial é a funcionalização endohédrica, ou seja, o preenchimento dos nanotubos com átomos ou moléculas de pequenas dimensões [25]. A modificação das paredes dos nanotubos, seja ela por funcionalização covalente ou não-covalente, altera as propriedades superficiais, influenciando diretamente a capacidade de adsorção dos nanotubos.

Aplicações

Os nanotubos de carbono apresentam propriedades eletrônicas, mecânicas e químicas muito interessantes. A elevada condutividade, a resistência à tração e a estabilidade química, possibilitam a utilização dos nanotubos de carbono em variadas aplicações tecnológicas.

Um domínio de aplicação importante, fruto da elevada área superficial e baixa resistividade, é a eletroquímica, sendo exemplos o desenvolvimento de supercondensadores [26], dispositivos de armazenamento de hidrogênio [27, 28] e a fabricação de células solares [29]. Devido à sua morfologia peculiar, ao papel dos defeitos de superfície e ao facto dos nanotubos poderem estar abertos ou fechados nas extremidades, podem existir interações cooperativas ou sinérgicas entre a fase de carbono e um metal ou óxido metálico que seja incorporado na sua superfície, sendo mesmo possível obter materiais com elevada atividade fotocatalítica, como tem sido com-

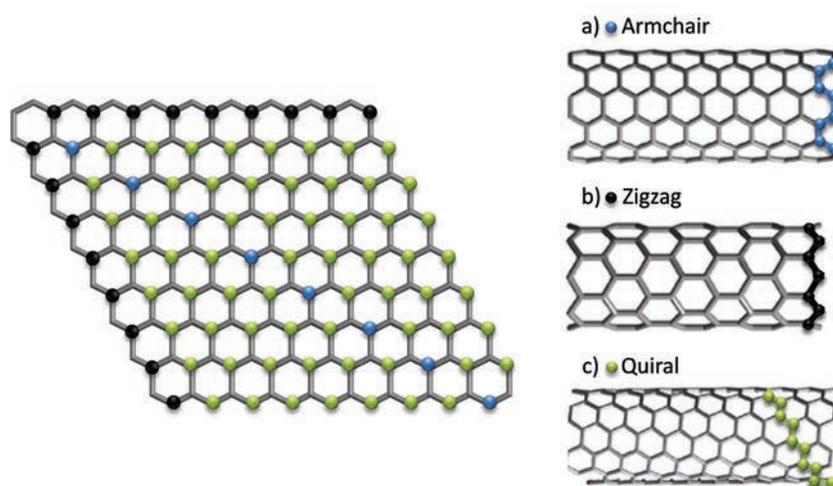


Figura 3 – Classificação de nanotubos de carbono de parede simples com geometria e propriedades distintas: (a) “cadeira de braços” (*armchair*), (b) “zigue-zague” (*zigzag*) e (c) quiral. Adaptado de [11]. Copyright (1995) Elsevier

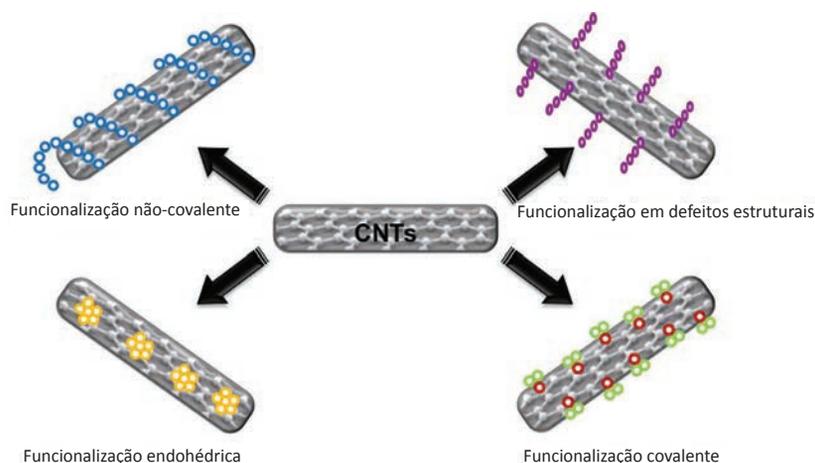


Figura 4 – Métodos de funcionalização dos nanotubos de carbono. Adaptado de [19]. Copyright (2002) Wiley Online Library

provado pelo nosso grupo de investigação [30-34]. Além disso, como os recentes avanços da indústria eletrônica são baseados na miniaturização de dispositivos (o que traz consigo um aumento no desempenho da velocidade de processamento e na densidade dos circuitos), os nanotubos de carbono desempenham também um papel relevante neste domínio, uma vez que, quando utilizados na fabricação de tais dispositivos, permitem ampliar o grau de miniaturização. Os nanotubos de carbono podem ser usados para fabricar transistores e memórias de computador, ou mesmo em outros domínios, de investigação no nosso grupo, como são exemplos a sua utilização como catalisadores em processos de tratamento de águas e de química fina [35-38], e o desenvolvimento de membranas para dessalinização e purificação de águas.

GRAFENO

O grafeno, nome dado à monocamada de grafite (Figura 5a), foi observado experimentalmente muito antes [39] do seu isolamento e identificação em 2004 [4]. Consiste numa rede bidimensional constituída por uma estrutura hexagonal de átomos de carbono com hibridização sp^2 , em que as distâncias C-C são aproximadamente 1,42 Å, com uma espessura de um átomo de carbono (aproximadamente 1 Angstrom = 10^{-8} cm). Para obter este material, o grupo liderado por Andre Geim, da Universidade de Manchester (Reino Unido), recorreu a um procedimento aparentemente simples, usando uma fita adesiva convencional, um lápis e aplicando um processo de exfoliação mecânica. O grafeno é o elemento estrutural mais básico de alguns alótropos do carbono e, por este

motivo, a sua estrutura é considerada a mãe de outras formas alotrópicas do carbono, como se mostra na Figura 5 [40].

Propriedades

O grafeno não só é o material mais fino de todos os materiais que são conhecidos, como também é considerado mais forte do que o diamante, sendo além disso flexível e extremamente duro. As propriedades eletrônicas do grafeno são únicas e constituem provavelmente o aspeto mais intrigante deste material. Isto deve-se ao facto

dos portadores de carga no grafeno serem descritos como fermiões de Dirac, sem massa, e com uma mobilidade excepcionalmente elevada, possibilitando a observação de fenómenos quânticos à temperatura ambiente [40]. Além de conduzir corrente elétrica à temperatura ambiente melhor que qualquer outro material, também é transparente, absorvendo apenas 2,3% da luz que incide sobre ele [41]. Parte da translucidez advém do facto de estarmos perante um material que tem apenas um átomo de espessura (Figura 6). É a combinação de tais propriedades, como a alta resistência,

a flexibilidade e o potencial para modificação química, que tem suscitado o grande interesse no grafeno.

Métodos de síntese

Entre os métodos de síntese mais usados para a produção de grafeno destaca-se a exfoliação das folhas de grafite por oxidação, utilizando oxidantes químicos fortes tais como HNO_3 , KMnO_4 e H_2O_2 (Figura 7). Como as folhas de carbono resultantes deste método contêm normalmente grupos funcionais, como ácidos carboxílicos, hidroxilos e epóxidos, o material é normalmente designado como óxido de grafeno. Estes grupos funcionais possibilitam a dispersão de folhas de óxido de grafeno em solventes polares, para assim permitir o seu estudo em meio líquido ou fluido.

Após o processo oxidativo, a rede sp^2 é parcialmente distorcida, podendo ser restaurada através de metodologias de redução [42], tais como térmica [43], química [44], eletroquímica [45], fototérmica [46], fotocatalítica [47], sonoquímica [48] ou com recurso a micro-ondas [49]. A síntese de grafeno também é possível a partir do corte de nanotubos de carbono [50, 51]. A técnica de deposição química em fase vapor (Figura 8), sobre metais ou superfícies de silício, tem sido a mais utilizada para estudar as propriedades físicas, óticas, eletrônicas e espectroscópicas do grafeno, além de ser uma

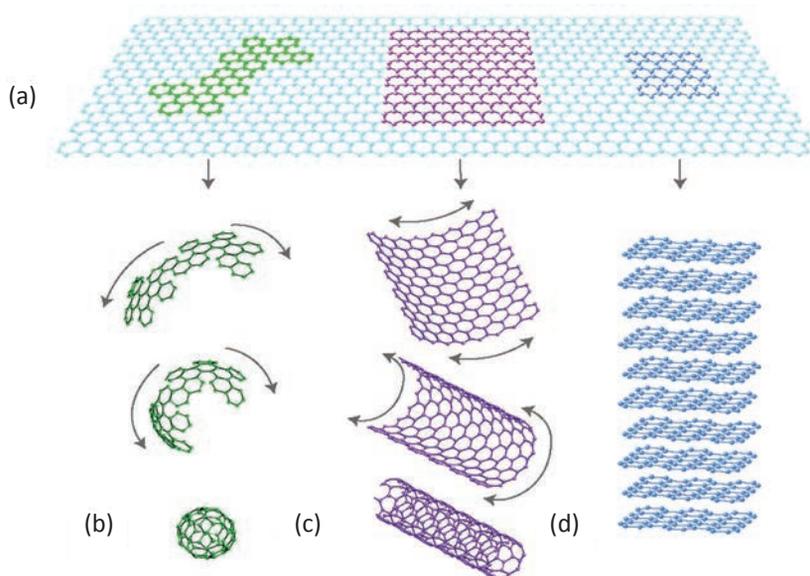


Figura 5 – (a) Grafeno, um material 2-D que serve de estrutura básica para alótropos de carbono em todas as dimensões. Pode (b) formar um fullereno, (c) ser enrolado na forma de um nanotubo ou (d) ser empilhado formando a grafite. Reproduzido com permissão de [40]. Copyright (2007) Nature Publishing Group

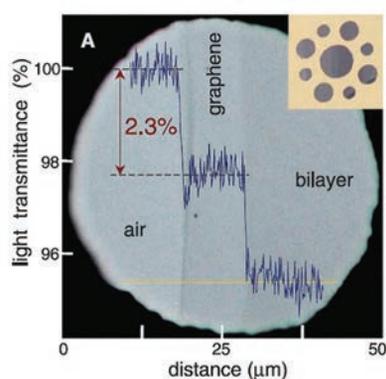


Figura 6 – Fotografia de grafeno usado num ensaio de transmitância. Este cristal de espessura monoatômica pode ser visto a olho nu porque absorve apenas 2,3% de luz branca. Reproduzido com permissão de [41]. Copyright (2008) The American Association for the Advancement of Science

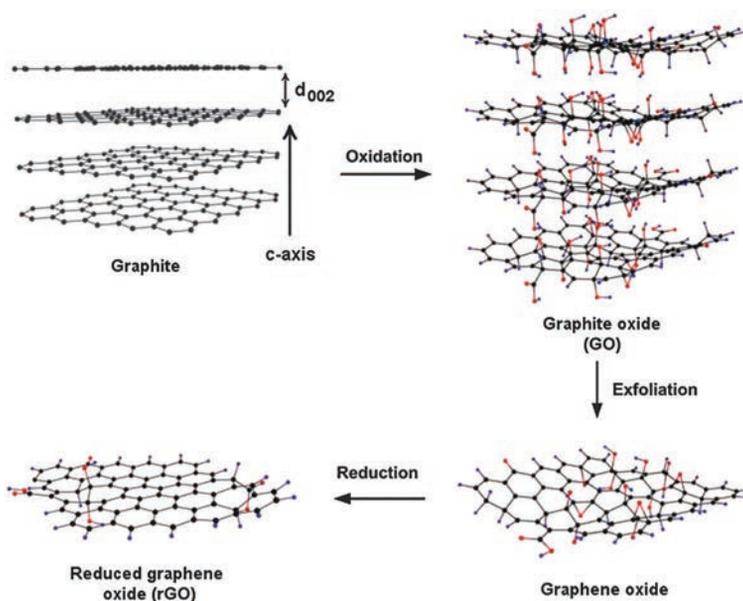


Figura 7 – Ilustração sobre a preparação do óxido de grafeno reduzido. Reproduzido com permissão de [42]. Copyright (2011) Wiley Online Library

das técnicas mais promissoras para a produção de filmes de grafeno em larga escala [52, 53].

Aplicações

A elevada condutividade elétrica, combinada com a sua resistência, flexibilidade e transparência, tornam o grafeno no material ideal para aplicações em dispositivos eletrónicos que sejam flexíveis, tendo sido demonstrado que podem ser fabricados ecrãs tácteis com este material [52]. Devido à vantagem proveniente da elevada mobilidade dos eletrões, o grafeno é ideal na conceção de transístores de alta frequência para aplicações exigentes no domínio da eletrónica [54, 55]. Estes componentes poderão ser essenciais para a criação de computadores ultra-rápidos.

O grafeno também pode ser usado como suporte para fixar nanopartículas metálicas (Au, Pt) e/ou semicondutoras (ZnO, TiO₂) (Figura 9) [56], tendo já sido produzidos compósitos de óxido de grafeno-metal [48, 49] e compósitos de óxido de grafeno-semicondutor [47]. Nestes materiais, o grafeno pode atuar simplesmente como suporte das nanopartículas ou mesmo de forma direta nas reacções catalíticas. Neste contexto, têm sido estudados no nosso grupo de investigação materiais compósitos combinando óxido de grafeno e TiO₂ [57-59].

Estes catalisadores apresentaram uma elevada atividade fotocatalítica para degradação e mineralização de poluentes orgânicos quando utilizada radiação UV-Vis e radiação visível, reflexo da capacidade do grafeno para melhorar a separação de carga nos semicondutores, e também facilitar o transporte de eletrões.

O grafeno também desempenha um papel relevante como suporte para aumentar a área eletrocatalítica em células de combustível, bem como noutros sistemas de conversão de energia: na literatura encontram-se descritos exemplos muito promissores de aplicações em células de combustível e baterias de ião lítio [60, 61]. Verificou-se também que a dispersão de nanopartículas de semicondutores em folhas de óxido de grafeno melho-

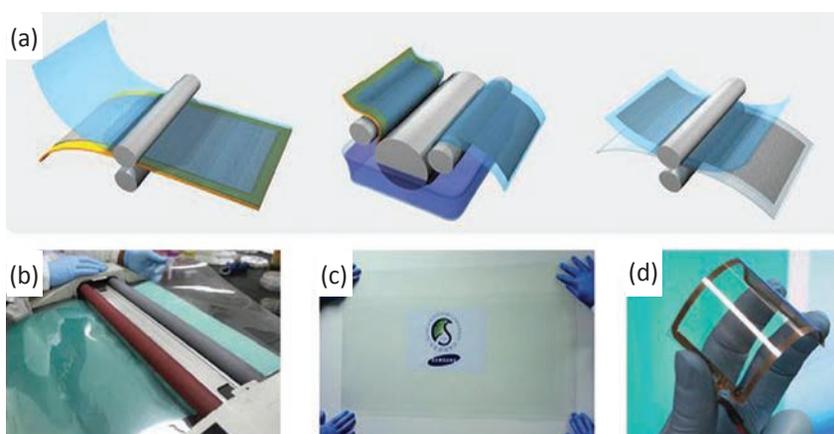


Figura 8 – (a) Esquema da produção (baseada em rolos) de filmes de grafeno sobre uma lâmina de cobre. O processo inclui a adesão de suportes poliméricos, lavagem do cobre, secagem e transferência para um substrato. (b) Transferência dos filmes de grafeno (roll-to-roll) a partir de uma fita de libertação térmica para um filme de PET a 120°C. (c) Transferência do filme de grafeno para uma lâmina de PET de 35 polegadas. (d) Montagem de um painel de PET/grafeno mostrando excelente flexibilidade. Reproduzido com permissão de [52]. Copyright (2010) Nature Publishing Group

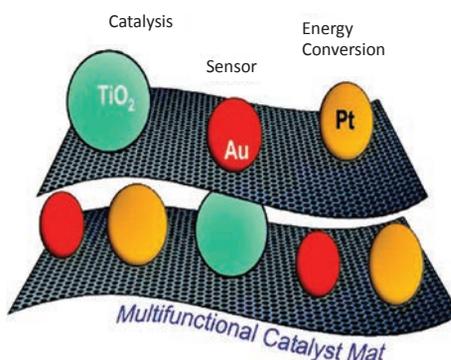


Figura 9 – Ilustração esquemática do compósito de grafeno com metais e óxidos de metais. Reproduzido com permissão de [56]. Copyright (2010) American Chemical Society

ra o desempenho das células fotovoltaicas [47].

CONCLUSÕES

Nos últimos anos foram isoladas e identificadas várias formas de carbono nanoestruturado, em particular os nanotubos de carbono e, mais recentemente, o grafeno. Estes materiais despertaram um grande interesse na comunidade científica devido a um conjunto de propriedades surpreendentes muito interessantes, ao nível da sua estrutura electrónica, das características mecânicas, térmicas, óticas, entre outras.

Devido às suas propriedades, simultaneamente únicas e excepcionais, estas duas formas alotrópicas do carbono podem encontrar utilidade nas mais variadas aplicações, como sejam o desenvolvimento de transístores de alta frequência ou, no caso particular do grafeno, de dispositivos electrónicos maleáveis. Estas aplicações têm potenciado o desenvolvimento de pro-

cessos economicamente viáveis para produção de nanotubos de carbono e de grafeno em grande escala, prevenindo-se que estes materiais, enquadrados nas áreas científicas da nanociência e da nanotecnologia, tenham num futuro próximo um papel de grande relevo na sociedade.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem os projetos PTDC/AAC-AMB/122312/2010 e PTDC/AAC-AMB/110088/2009, financiados pela FCT - Fundação para a Ciência e a Tecnologia – e FEDER através do programa COMPETE.

REFERÊNCIAS

- [1] H.O. Pierson, Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes - Properties, Processing and Applications, William Andrew Publishing/Noyes, 1993.
- [2] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley, Nature 318 (1985) 162-163.

- [3] S. Iijima, *Nature* 354 (1991) 56-58.
- [4] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* 306 (2004) 666-669.
- [5] M. Terrones, A.R. Botello-Méndez, J. Campos-Delgado, F. López-Urías, Y.I. Vega-Cantú, F.J. Rodríguez-Macías, A.L. Elías, E. Muñoz-Sandoval, A.G. Cano-Márquez, J.-C. Charlier, H. Terrones, *Nano Today* 5 (2010) 351-372.
- [6] L. Dai, A.W.H. Mau, *Advanced Materials* 13 (2001) 899-913.
- [7] L. Nemes, *Fullerene Science and Technology* 5 (1997) 627-628.
- [8] A. Oberlin, M. Endo, T. Koyama, *Journal of Crystal Growth* 32 (1976) 335-349.
- [9] T.I. Sumio Iijima, *Nature* 363 (1993) 603-605.
- [10] D.S. Bethune, C.H. Klang, M.S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, *Nature* 363 (1993) 605-607.
- [11] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito, *Carbon* 33 (1995) 883-891.
- [12] R.H. Baughman, A.A. Zakhidov, W.A. de Heer, *Science* 297 (2002) 787-792.
- [13] A. Thess, R. Lee, P. Nikolaev, H. Dai, P. Petit, J. Robert, C. Xu, Y.H. Lee, S.G. Kim, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, G.E. Scuseria, D. Tománek, J.E. Fischer, R.E. Smalley, *Science* 273 (1996) 483-487.
- [14] T. Guo, P. Nikolaev, A. Thess, D.T. Colbert, R.E. Smalley, *Chemical Physics Letters* 243 (1995) 49-54.
- [15] W.Z. Li, S.S. Xie, L.X. Qian, B.H. Chang, B.S. Zou, W.Y. Zhou, R.A. Zhao, G. Wang, *Science* 274 (1996) 1701-1703.
- [16] C. Lasorsa, M. Perez, B. Lerner, I. Toper, R. Versaci, A. Lamagna, A. Boselli, *Procedia Materials Science* 1 (2012) 558-563.
- [17] M. Biedel, S. Buchholz, V. Michele, L. Mleczko, R. Rudolf, M. Voetz, A. Wolf, *physica status solidi (b)* 244 (2007) 3939-3943.
- [18] S. Banerjee, T. Hemraj-Benny, S.S. Wong, *Advanced Materials* 17 (2005) 17-29.
- [19] A. Hirsch, *Angewandte Chemie International Edition* 41 (2002) 1853-1859.
- [20] H. Gaspar, C. Pereira, S.L.H. Rebelo, M.F.R. Pereira, J.L. Figueiredo, C. Freire, *Carbon* 49 (2011) 3441-3453.
- [21] M.E. Lipińska, S.L.H. Rebelo, M.F.R. Pereira, J.A.N.F. Gomes, C. Freire, J.L. Figueiredo, *Carbon* 50 (2012) 3280-3294.
- [22] P. Shu, C. Kyeongjae, *Nanotechnology* 11 (2000) 57-60.
- [23] S.B. Fagan, A.G.S. Filho, J.M. Filho, P. Corio, M.S. Dresselhaus, *Chemical Physics Letters* 406 (2005) 54-59.
- [24] S.B. Fagan, L.B. da Silva, R. Mota, *Nano Letters* 3 (2003) 289-291.
- [25] L. Guan, K. Suenaga, S. Okubo, T. Okazaki, S. Iijima, *Journal of the American Chemical Society* 130 (2008) 2162-2163.
- [26] H. Pan, J. Li, Y. Feng, *Nanoscale Research Letters* 5 (2010) 654-668.
- [27] R. Oriňáková, A. Oriňák, *Fuel* 90 (2011) 3123-3140.
- [28] H.-M. Cheng, Q.-H. Yang, C. Liu, *Carbon* 39 (2001) 1447-1454.
- [29] Y.H. Kim, L. Müller-Meskamp, A.A. Zakhidov, C. Sachse, J. Meiss, J. Bikova, A. Cook, A.A. Zakhidov, K. Leo, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 96 (2012) 244-250.
- [30] W. Wang, P. Serp, P. Kalck, J.L. Faria, *Applied Catalysis B: Environmental* 56 (2005) 305-312.
- [31] W. Wang, P. Serp, P. Kalck, C.G. Silva, J.L. Faria, *Materials Research Bulletin* 43 (2008) 958-967.
- [32] C.G. Silva, J.L. Faria, *Applied Catalysis B: Environmental* 101 (2010) 81-89.
- [33] M.J. Sampaio, C.G. Silva, R.R.N. Marques, A.M.T. Silva, J.L. Faria, *Catalysis Today* 161 (2011) 91-96.
- [34] R.R.N. Marques, M.J. Sampaio, P.M. Carrapiço, C.G. Silva, S. Morales-Torres, G. Dražič, J.L. Faria, A.M.T. Silva, *Catalysis Today* doi: 10.1016/j.cattod.2012.1010.1008, in press.
- [35] B.F. Machado, H.T. Gomes, P. Serp, P. Kalck, J.L. Faria, *ChemCatChem* 2 (2010) 190-197.
- [36] J. Garcia, H.T. Gomes, P. Serp, P. Kalck, J.L. Figueiredo, J.L. Faria, *Catalysis Today* 102-103 (2005) 101-109.
- [37] H.T. Gomes, P.V. Samant, P. Serp, P. Kalck, J.L. Figueiredo, J.L. Faria, *Applied Catalysis B: Environmental* 54 (2004) 175-182.
- [38] J. Garcia, H.T. Gomes, P. Serp, P. Kalck, J.L. Figueiredo, J.L. Faria, *Carbon* 44 (2006) 2384-2391.
- [39] H.P. Boehm, A. Clauss, G. Fischer, U. Hofmann, Pergamon Press, Oxford 2 (1962) 73.
- [40] A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nat Mater* 6 (2007) 183-191.
- [41] R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselov, T.J. Booth, T. Stauber, N.M.R. Peres, A.K. Geim, *Science* 320 (2008) 1308-1308.
- [42] H. Bai, C. Li, G. Shi, *Advanced Materials* 23 (2011) 1089-1115.
- [43] H.C. Schniepp, J.-L. Li, M.J. McAllister, H. Sai, M. Herrera-Alonso, D.H. Adamson, R.K. Prud'homme, R. Car, D.A. Saville, I.A. Aksay, *The Journal of Physical Chemistry B* 110 (2006) 8535-8539.
- [44] X. Gao, J. Jang, S. Nagase, *The Journal of Physical Chemistry C* 114 (2009) 832-842.
- [45] G.K. Ramesha, S. Sampath, *The Journal of Physical Chemistry C* 113 (2009) 7985-7989.
- [46] V. Abdelsayed, S. Moussa, H.M. Hassan, H.S. Aluri, M.M. Collinson, M.S. El-Shall, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 1 (2010) 2804-2809.
- [47] Y.H. Ng, I.V. Lightcap, K. Goodwin, M. Matsumura, P.V. Kamat, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 1 (2010) 2222-2227.
- [48] K. Vinodgopal, B. Neppolian, I.V. Lightcap, F. Grieser, M. Ashokkumar, P.V. Kamat, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 1 (2010) 1987-1993.
- [49] K. Jajuja, J. Linn, S. Melton, V. Berry, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 1 (2010) 1853-1860.
- [50] M. Terrones, *Nature* 458 (2009) 845-846.
- [51] L. Jiao, L. Zhang, X. Wang, G. Diankov, H. Dai, *Nature* 458 (2009) 877-880.
- [52] S. Bae, H. Kim, Y. Lee, X. Xu, J.-S. Park, Y. Zheng, J. Balakrishnan, T. Lei, H. Ri Kim, Y.I. Song, Y.-J. Kim, K.S. Kim, B. Ozyilmaz, J.-H. Ahn, B.H. Hong, S. Iijima, *Nature Nanotechnology* 5 (2010) 574-578.
- [53] X. Li, W. Cai, J. An, S. Kim, J. Nah, D. Yang, R. Piner, A. Velamakanni, I. Jung, E. Tutuc, S.K. Banerjee, L. Colombo, R.S. Ruoff, *Science* 324 (2009) 1312-1314.
- [54] L. Liao, Y.-C. Lin, M. Bao, R. Cheng, J. Bai, Y. Liu, Y. Qu, K.L. Wang, Y. Huang, X. Duan, *Nature* 467 (2010) 305-308.
- [55] L. Britnell, R.V. Gorbachev, R. Jalil, B.D. Belle, F. Schedin, A. Mishchenko, T. Georgiou, M.I. Katsnelson, L. Eaves, S.V. Morozov, N.M.R. Peres, J. Leist, A.K. Geim, K.S. Novoselov, L.A. Ponomarenko, *Science* 335 (2012) 947-950.
- [56] P.V. Kamat, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 1 (2009) 520-527.
- [57] L.M. Pastrana-Martínez, S. Morales-Torres, V. Likodimos, J.L. Figueiredo, J.L. Faria, P. Falaras, A.M.T. Silva,

- Applied Catalysis B: Environmental 123–124 (2012) 241-256.
- [58] S. Morales-Torres, L.M. Pastrana-Martínez, J.L. Figueiredo, J.L. Faria, A.M.T. Silva, Environ. Sci. Pollut. Res. 19 (2012) 3676-3687.
- [59] S. Morales-Torres, L.M. Pastrana-Martínez, J.L. Figueiredo, J.L. Faria, A.M.T. Silva, Applied Surface Science doi: 10.1016/j.apusc.2012.1011.1157, in press.
- [60] B. Seger, P.V. Kamat, The Journal of Physical Chemistry C 113 (2009) 7990-7995.
- [61] A. Abouimrane, O.C. Compton, K. Amine, S.T. Nguyen, The Journal of Physical Chemistry C 114 (2010) 12800-12804.

ATUALIDADES CIENTÍFICAS

VISLUMBRE DOS ESQUIVOS INTERMEDIÁRIOS DE BRESLOW

Uma procura de 54 anos da parte dos químicos do carbeno pode ter encetado um passo decisivo para a sua resolução: investigadores alemães afirmam que geraram e caracterizaram os esquivos intermediários de Breslow, elementos essenciais nos campos da bioquímica e da catálise (Angew. Chem. Int. Ed., DOI: 10.1002/anie.201205878).

Os intermediários de Breslow foram considerados como o bosão de Higgs do campo da catálise dos carbenos N-heterocíclicos. Foram propostos inicialmente por Ronald Breslow, da Universidade de Columbia, em 1958, quando este sugeriu que as reações mediadas por tiamina dependem da reatividade de carbenos. Assim, a base teórica deste campo de estudo depende da existência deste tipo de carbenos, que, no entanto, nunca foram isolados até ao momento.

Albrecht Berkessel, da Universidade de Colónia, e colaboradores, construíram os seus intermediários através da combinação de aldeídos aromáticos com carbeno saturado. Assim, supuseram que estes catalisadores de carbeno eram suficientemente lentos de forma a tornarem os intermediários detetáveis. Deste modo conseguiram gerar intermediários com estabilidade suficiente para serem caracterizados, mas com suficiente reatividade para se comportarem como previsto por RMN.

Jeffrey W. Bode do ETH Zurich afirma que “já anteriormente tínhamos observado sugestões de intermediários de Breslow, no entanto, este trabalho é o primeiro a identificá-los conclusivamente”. Porém, Karl A. Scheidt, da Universidade de Northwestern, avisa que “tal como o bosão de Higgs, as conclusões apresentadas neste trabalho não serão consensuais e nem todos os químicos concordarão que este trabalho possa representar a resolução definitiva desta questão, já que à maioria dos novos intermediários falta um átomo de enxofre, não sendo totalmente aromáticos como proposto por Breslow”.

De qualquer modo acrescenta que “este trabalho é um importante passo em frente e deve ser tomado em consideração conjuntamente com os reportes de análogos de Breslow desoxi, metilados e de nitrogénio, realizados por grupos da Universidade de Colorado State e da Universidade de Munique, no início deste ano”. Assim, todos estes trabalhos “constituem uma base excelente para a compreensão da versatilidade dos carbenos”, finaliza Scheidt.

(adaptado do artigo de 29/10/2012 de Carmen Drahl: Chemists Approach Elusive Breslow Intermediate, <http://cen.acs.org/articles/90/i44/Chemists-Approach-Elusive-Breslow-Intermediate.html>)

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

OS SOLVENTES TORNAM OS CATALISADORES MAIS EFICIENTES

Uma equipa liderada por Dominik Marx, do Centre for Theoretical Chemistry da Ruhr-Universität Bochum, tem estudado os processos de catálise heterogénea ao nível molecular através das denominadas simulações dinâmicas moleculares ab initio, que permitem concluir sobre a existência de transferência de cargas entre a água e o catalisador. Os investigadores especulam que desta forma a fase líquida estabiliza as cargas à superfície do catalisador sólido. Os locais onde este fenómeno ocorre poderão ser os centros ativos do catalisador onde a reação acontece. No entanto, ao contrário da água, uma fase gasosa não consegue “comunicar” deste modo com o catalisador, já que não é possível qualquer transferência de cargas com a fase gasosa.

Num trabalho posterior, Dominik Marx estudou um catalisador de cobre e óxido de zinco usado para a síntese industrial de metanol em fase gasosa. As simulações computacionais demonstraram igualmente que as interações entre as fases sólida e gasosa representam um papel importante na definição da eficiência do processo. Dependendo das condições de temperatura e de pressão, o hidrogénio liga-se à superfície do catalisador e estabiliza indiretamente os centros ativos que surgem neste caso devido à transferência de eletrões entre o metal e o óxido. Assim, as condições termodinâmicas da fase gasosa põem a superfície num estado que é particularmente favorável à atividade do catalisador.

Os estudos demonstram que a eficiência catalítica pode ser controlada, quer pela escolha do solvente, como pela manipulação de variáveis termodinâmicas de uma fase gasosa, através de mecanismos completamente diferentes, que os investigadores conseguiram elucidar pela utilização dos mesmos métodos de simulação. Este facto torna diretamente comparáveis os resultados obtidos e permite aos teóricos o estudo do aperfeiçoamento do sistema cobre/óxido de zinco através da substituição da fase gasosa por um solvente apropriado.

(adaptado do artigo de 21/02/2013: When Water Speaks: Solvents Make Catalysts More Efficient, <http://www.sciencedaily.com/releases/2013/02/130221084705.htm>)

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



F.S.MÓVEL
MOBILIÁRIO E EQUIPAMENTO INDUSTRIAL, LDA



**HOTTES DE QUÍMICA, ARMÁRIOS VENTILADOS PARA ÁCIDOS E BASES, MESAS ANTIVIBRÁTEIS
BANCADAS CENTRAIS E MURAIS, LAVA-LOUÇAS, CHUVEIROS/LAVA-OLHOS DE EMERGÊNCIA**

**Rua Caminho do Senhor, 313-317 • 4410-083 Serzedo V.N.Gaia
Tel.: 227 533 567/227 539 353 • Fax: 227 628 102 Site: www.fsmoveel.com • E-Mail: geral@fsmoveel.com**

O ATP E OS ATROPELOS DA QUÍMICA

CARLOS CORRÉA*

O uso vulgarizado de certos termos, como “ligações ricas em energia” e “compostos muito calóricos”, que muitos autores utilizam ao tratar de bioenergética, acompanha uma série de erros que circulam na Internet, nomeadamente a ideia de que a cisão de ligações químicas liberta energia, de que a energia libertada em reações químicas resulta da cisão de uma dada ligação nos reagentes, esquecendo as ligações formadas nos produtos da reação. Neste artigo investiga-se a origem destes erros, apresentam-se exemplos da sua intensa difusão e, para evidenciar a sua inconsistência, analisam-se algumas reações muito simples.

Quando ensinei Química Médica a futuros médicos, há cerca de quatro décadas, verifiquei que os alunos estranhavam que para partir ligações químicas fosse necessário fornecer energia às moléculas e argumentavam com o caso do ATP, cuja energia fornecida às células proviria da quebra de “ligações ricas em energia”!

Segundo estas ideias erradas, a energia libertada numa reação proviria da quebra de ligações químicas ditas “de alta energia” presentes em compostos “ricos em energia”, como os carbo-hidratos, o ATP e outros.

O que sucede, afinal, é antes uma libertação de energia que resulta de um balanço, a nível molecular, entre as energias das ligações partidas e ligações formadas e de outros factores de menor grandeza, como a deslocalização electrónica, os efeitos estereo-químicos e os efeitos indutores. Sob o ponto de vista termodinâmico, a energia associada a uma reação química (a energia de Gibbs da reação) é o resultado da diferença entre as energias de formação de Gibbs dos produtos e dos reagentes. Não tem qualquer significado associar a energia posta em jogo numa reação à ruptura das tais ligações ditas “ricas em energia”.

Verifiquei, mais tarde, que o mesmo erro circulava no ensino secundário e cheguei mesmo a fazer uma série de

ações pedagógicas para professores de Biologia em escolas secundárias do norte do país, acompanhado pelo Dr. Adalmiro de Castro e Prof. Moradas Ferreira, com o objectivo de debater um pouco os aspetos energéticos da formação e ruptura de ligações químicas e esclarecer o caso da reação exotérmica de hidrólise do ATP (Adenosine TriPhosphate), Figura 1.

Procurei averiguar a causa desta ideia errada e consultei alguns livros de Bioquímica e verifiquei que, no geral, não aparecem os mesmos erros no tratamento da hidrólise do ATP, mas alguns autores deixam escapar frases que podem ser interpretadas erradamente, como se se libertasse energia quando se partem ligações químicas:

a) “(...) a ruptura de uma ligação entre dois grupos fosforilo, num número suficiente de moléculas de ATP, liberta essa quantidade de energia” [1]

b) “A ligação pirofosfato do ATP é a fonte de energia dos processos endergónicos que ocorrem na célula” [2]

O que deveria ser dito era que a) “(...) a hidrólise (cisão por ação da água) de uma ligação entre dois grupos fosforilo, num número suficiente de moléculas de ATP, liberta essa quantidade de energia” e que b) “A hidrólise (cisão por ação da água) da ligação pirofosfato do ATP é a fonte de energia dos processos endergónicos que ocorrem na célula”.

c) Na Wikipédia [3] o assunto é tratado corretamente, chamando a atenção para a reação global e não para a ruptura de uma simples ligação: “Deve-se levar em conta que a quebra do ATP não é simplesmente um rompimento de ligações químicas. Sabe-se que a destruição de ligações químicas é um processo endotérmico, e isso seria uma contra-

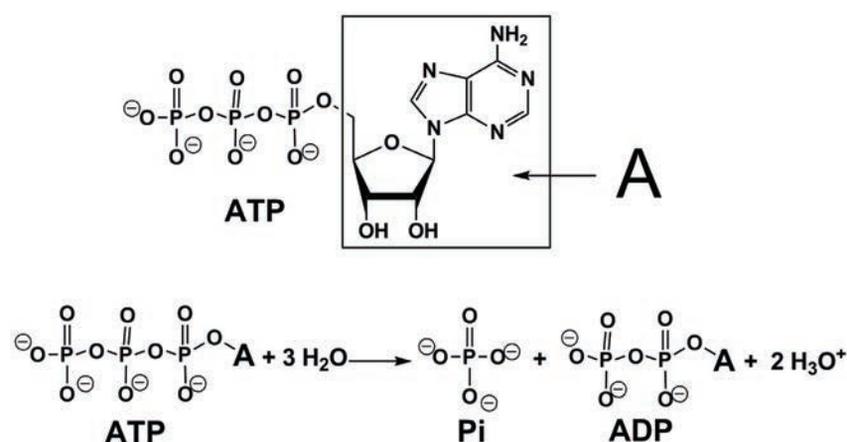


Figura 1 – Hidrólise do ATP

* Faculdade de Ciências
Universidade do Porto
E-mail: ccorrea@fc.up.pt

dição. Na verdade, a transformação da ATP em ADP + P é uma hidrólise, ou seja, a água é um dos reagentes desse processo. A formação de ligações covalentes no final da transformação libera mais energia do que a absorção na quebra das ligações presentes entre os átomos das moléculas de ATP e água. Dessa forma, a reação global acaba se tornando exotérmica”

Apesar disto, deixa escapar uma frase que pode levar a interpretações erradas: “A energia é armazenada nas ligações entre os fosfatos”, o que não é verdade, pois as ligações químicas não armazenam energia, mas exigem energia para serem quebradas.

É de salientar o livro Bioquímica Geral [4], que critica o uso da designação “ricos em energia” nos seguintes termos: “É comum dizer-se que os compostos cuja variação de ΔG° de hidrólise é muito negativa são ricos “em energia” e que as ligações que são hidrolisadas são “ricas em energia” o que não é nada evidente. Acontece unicamente que a entalpia livre padrão de formação (actualmente “energia de formação de Gibbs”) dos produtos é mais baixa que a entalpia livre padrão de formação dos reagentes”. Na edição anterior, referia igualmente “(...) designada por “ligação rica em energia”, designação que não é muito feliz uma vez que é a energia libertada na hidrólise que é elevada e não a energia da ligação”.

No sítio [5] trata-se adequadamente o assunto e até se chama a atenção para a ideia errada, ensinada algumas vezes em Biologia, de se libertar energia por quebra de ligações: “We have already seen that chemical energy is released when chemical bonds **form** (...) Energy is released when ATP breaks down to produce ADP + orthophosphate. So, are we being told that in biology the breaking of a bond releases energy? Is this the opposite of what we learn in chemistry? That is a very good question to ask your teachers”.

Na realidade liberta-se energia na hidrólise do ATP, mas essa energia provém principalmente de um balanço entre a energia gasta na quebra de al-

gumas ligações e a energia libertada na formação de outras ligações.

L. Stryer, no seu livro de Bioquímica [6] refere a origem destas designações enganosas: “O ATP é muitas vezes denominado um fosfato de alta energia e as suas ligações fosfoanidrido (ligações das pontes de oxigénio para os átomos de fósforo) referidas como ligações de alta energia. Deve notar-se que não há nada de especial em relação às ligações propriamente ditas. Elas são ligações de alta energia no sentido de que se liberta muita energia quando elas são hidrolisadas, pelas razões apresentadas acima. O termo de Lipmann “ligação de alta energia” e o seu símbolo $\sim P$ para um composto contendo um grupo fosfato com elevado potencial de transferência são notações vivas, concisas e úteis. De facto, esta linguagem figurada de Lipmann (Lipmann’s squiggle) contribuiu muito para estimular o interesse na bioenergética”.

Apesar disto, continua a usar o termo incorrecto “ligação de alta energia” como se a energia libertada resultasse da quebra de determinada ligação. Fritz Albert Lipmann foi um notável professor e investigador, Prémio Nobel da Fisiologia e Medicina de 1953, com H.A. Krebs, pela descoberta da coenzima A. O artigo onde foram introduzidas estas designações intitula-se “Metabolic Generation and Utilization of Phosphate Bond Energy” [7] e nele Lipmann parece reduzir a hidrólise de ésteres fosfóricos à quebra de ligações.

Ao esclarecer o termo “Potencial de um Grupo” refere, na página 102: “These biological interesting linkages designed to transfer groups with loss of energy will be called “weak” linkages based on the usual chemical nomenclature with respect to cleavage processes. If, with cleavage, large amounts of energy can be made free (negative change in free energy – actualmente designada energia de Gibbs de reação - the tendency to burst the linkage is relatively great: thus a weak linkage (small affinity). If little energy is freed with cleavage, or energy has even to be furnished, the linkage is called strong (large affinity). Now, very often the biochemist and likewise

the synthetic organic chemist is not interested to talk so much about the weakness of the linkage by which a group is bond as about the energy accumulated in the linkage (o que está errado, como se explica mais à frente neste artigo). Instead of emphasizing the negative, the escape of energy through cleavage, he wants to emphasize the positive, the largeness of energy present in the linkage before cleavage, which determines the group potential, the escaping tendency of the group”.

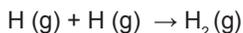
É evidente que este modo incorrecto de localizar numa ligação a energia libertada num processo químico e centrar a reação na ruptura de uma ligação, esquecendo a formação de novas ligações, em nada diminuiu os valiosos trabalhos de Lipmann.

Será que estas designações figuradas de Lipmann são concisas e úteis, como refere Stryer? Vejamos como foram interpretadas por inúmeros autores que publicam na Internet. Seria impossível referir todas as fontes que difundem estes erros, mas vou transcrever algumas ao acaso:

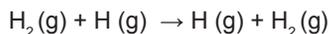
- 1) “En las células, la energía que recibe o cede el ATP es la contenida en el enlace entre su último fosfato y el resto de la molécula. El enlace se forma durante la síntesis de ATP: incorporan así energía, la que se cede cuando el enlace se escinde (Fig. B)” [8]
- 2) “ATP é (...) Os 2 últimos radicais fosfato estão ligados ao resto da molécula através de ligações de alta energia. A quantidade de energia libertada por cada uma dessas ligações por mole de ATP é de aproximadamente 11 kcal nas condições de temperatura e concentração de reagentes do músculo durante o exercício” [9]
- 3) “A ligação entre os grupos de fosfato $P \sim P$ ou $P \sim P \sim P$, indicada por linhas curvas envolvem uma grande quantidade de energia potencial armazenada” [10]
- 4) “A quebra da ligação química que o unia à molécula libera uma quantidade de energia que é utilizada nos processos bioquímicos;

- nesse caso, o ATP fica sendo ADP + P + energia para os processos vitais” [11]
- 5) “When the third phosphate bond is created, it immediately is broken and energy is released (...)” [12]
 - 6) “When broken, these bonds release about 7.3 kilocalories per mole (...)” [13]
 - 7) “The energy needed to carry out the reaction involving the substrates is generated by breaking the phosphate-phosphate bond in the ATP” [14]
 - 8) “The energy that is stored within an ATP molecule is released for your muscles to use when the bond between the second and third phosphate groups is broken” [15]
 - 9) “Because of the substantial amount of energy liberated when it is broken, the bond between the second and third phosphates is commonly described as a “high-energy” bond” [16]
 - 10) “The breaking of chemical bonds between the 2nd and 3rd phosphate groups provides most of the chemical energy used by a cell” [17]
 - 11) “As these chemical bonds are broken (as ATP is converted into ADP and an inorganic phosphate) the energy release is 12 kcal/mol in vivo (...)” [18]
 - 12) “The chemical bond between the phosphate groups and the adenosine is a high-energy bond. This means that energy is released when the bond is broken” [19]
 - 13) “At the energy-requiring site, the last phosphate group in the tail is broken off and the energy in the bond liberated” [20]
 - 14) “Most of the energy in ATP is contained in the bond between the second and third phosphate in what is known as the pyrophosphate bond. When the bond is broken, the scattered energy is used immediately to power a necessary process that the cell is doing” [21]
 - 15) “The P-O-P bond is an ordinary covalent bond, but it releases about 7.3 kcal/mol of free energy (under standard biochemical conditions) when it is broken” [22]
 - 16) “When ATP supplies energy to a reaction, it is usually the energy in the last bond that is delivered to the reaction” [23]
 - 17) “When a cell needs energy, it breaks this bond to form adenosine diphosphate (ADP) and a free phosphate molecule” [24]
 - 18) “The breaking of chemical bonds between the 2nd and 3rd phosphate groups provides most of the chemical energy used by a cell” [25]
 - 19) “The energy is stored in the P-P-P or the phosphate bond which is released when the bond is broken and ATP converts into ADP (...)” [26]
 - 20) “These molecules can transport energy because phosphate bonds contain a lot of potential energy, which is released when they are broken” [27]
 - 21) “(...) when the chemical bond between phosphate groups in ATP is broken, energy is released (...)” [28]
 - 22) “ATP provides energy by breaking its bond between its phosphates. It will break off one phosphate, and the energy from the bond breaking will give another reaction energy. The ATP molecule is unstable with 3 phosphates, so it wants to break its bond with that third phosphate to lower its energy level... so when it finds another molecule that needs energy, it donates it by breaking that third phosphate bond” [29]
- Todas estas transcrições mostram que muitos autores de textos, apesar de competentes na sua área científica, usam uma linguagem defeituosa ou mesmo errada, contribuindo para a divulgação de ideias deturpadas sobre assuntos básicos e importantes em Ciência. É constante a ideia errada de que há energia acumulada nas ligações químicas (por isso falam em “ligações ricas em energia”, em compostos muito energéticos) e de que da cisão dessas ligações se obtém energia. Até indicam a ligação onde se localiza a energia libertada!
- Tem uma certa piada ver as consequências físicas destas ideias absurdas. Se assim fosse, não existiam moléculas (nem agregados atômicos gigantes, como o diamante, o quartzo e muitos outros), pois a atomização das moléculas e desses agregados era fortemente exotérmica (ruptura das ligações...), a que acrescia o enorme aumento de entropia do sistema e do Universo. Todas as substâncias que existem seriam termodinamicamente instáveis, só sobrevivendo (até um dia) devido à sua estabilidade cinética.
- Os átomos só se mantinham ligados até que alguém lhes fornecesse a energia de ativação necessária para se separarem. Os foguetes no S. João teriam iniciado a dissociação do O₂ e N₂ atmosféricos, com tremendo aquecimento global; as painéis metálicas teriam explodido nas mãos dos cozinheiros e nós próprios teríamos sido volatilizados após termos dado um espirro suficientemente forte para ativar as reações de decomposição dos compostos que nos constituem.
- Mas não sejamos tão drásticos e analisemos casos simples, como a combustão fortemente exotérmica do di-hidrogénio no seio do ar, formando água:
- $$2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{g})$$
- Segundo a terminologia errada que encontrei na Internet teríamos um “composto rico em energia” (o combustível) com ligações H-H “ricas em energia” cuja cisão libertava grande quantidade de calor! Se compararmos as energias das ligações H-H (436 kJ/mol) e O=O (499 kJ/mol) concluímos que, afinal, quem é rico em energia é o O₂! A energia libertada vem do H₂ ou do O₂? Na hidrólise do ATP quem é “rico em energia”, o ATP ou a água? O que se passa é uma reação entre o di-hidrogénio e o dióxigénio da qual resulta a libertação de energia. É um disparate querer fazer aqui intervir qualquer composto “rico” ou “pobre em energia”.

Quando dois átomos de hidrogénio se ligam libertam-se 436 kJ/mol. De onde vem essa energia se não há ligações (de alta energia...) que possam partir?



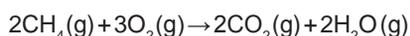
Quando uma molécula de di-hidrogénio reage com um átomo de hidrogénio:



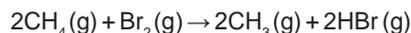
não se transfere qualquer energia para o exterior sob a forma de calor. Então a cisão da "ligação rica em energia" H-H não liberta energia?! Vejam até onde nos conduziam estas ideias absurdas postas a circular no mundo biológico!

As ligações químicas não contêm qualquer quantidade de energia. As ligações mais fortes são as mais "pobres em energia", são as que libertaram mais energia quando se formaram. A energia libertada ou consumida numa reação química resulta, fundamentalmente, de um balanço entre a energia libertada na formação das ligações nos produtos e da energia consumida na quebra das ligações nos reagentes. É um disparate querer associar a energia posta em jogo numa reação química a esta ou àquela ligação quando há várias ligações postas simultaneamente em jogo.

Todas as confusões que enchem a Internet e alguns manuais resultaram do uso de termos correntes, como substâncias "muito energéticas", substâncias "muito calóricas", em que se atribuem calorías às substâncias e não a certas reações em que elas participam. Note-se que estas substâncias conduzem a reações exotérmicas quando reagem com o oxigénio, mas poderão reagir endotermicamente com outros reagentes. Por exemplo, o metano reage com o dióxigénio originando CO_2 e H_2O , sendo a reação fortemente exotérmica:



No entanto, a reação do metano com o dibromo:



é endotérmica (ΔH_f é de cerca de +289 kJ/mol). Esta energia consumida corresponde à diferença entre a energia gasta na cisão de duas ligações C-H (2x414 kJ/mol) e uma ligação Br-Br (193 kJ/mol) e a energia libertada na formação de duas ligações H-Br (2x366 kJ/mol). Então, o metano é um composto de "alta" ou de "baixa" energia?!

Igualmente abusivo é localizar a energia nesta ou naquela ligação. Só em certos casos tem interesse, e é possível, particularizar as energias das diferentes ligações, como sucede nas reações de remoção de hidrogénio das posições alílicas de compostos insaturados nos processos de auto-oxidação de lípidos (Figura 2). Aqui podemos dizer que a remoção mais extensa de hidrogénio nessas posições se deve à menor energia das correspondentes ligações C-H (ligações mais fracas).

Como a ligação que se forma é a mesma em ambas as reações, a energia libertada na reação (1) é menor do que a libertada na reação (2), porque a ligação C-H a partir em (1) é mais forte do que em (2). Daqui resulta que a reação (2) é mais rápida que a reação (1), embora nem sempre as reações mais exotérmicas sejam mais rápidas. Em resumo:

- As designações "compostos e ligações de alta (ou baixa...) energia" não têm qualquer sentido físico e podem levar a conclusões erradas.
- A ruptura de ligações químicas consome energia, que tem de ser fornecida à molécula.
- A formação de ligações químicas liberta energia.

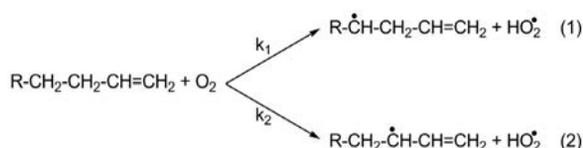


Figura 2 – Remoção de hidrogénio das posições alílicas de compostos insaturados nos processos de auto-oxidação de lípidos

d) Não tem sentido localizar a energia libertada nas reações químicas em qualquer dos reagentes, muito menos numa dada ligação.

REFERÊNCIAS

- L. S. Campos, "Entender a Bioquímica", Escolar Editora, 2009, 5.ª ed. pag. 202.
- I. Raw, A. Freedman e L. Mennucci, "Bioquímica, Fundamentos para as Ciências Biomédicas", Mc Graw-Hill do Brasil, 1981, vol. 1, pag. 232.
- http://pt.wikipedia.org/wiki/Trifosfato_de_adenosina (consultado em junho de 2012).
- J. H. Weil "Bioquímica Geral", Fundação Gulbenkian, 2000, 2.ª edição, pag. 168.
- <http://sci-culture.com/advancedpoll/GCSE/atp.php> (consultado em junho de 2012).
- L. Stryer, "Biochemistry", W. H. Freeman & Company, 1981, pag. 241.
- F. Lipmann, "Metabolic Generation and Utilization of Phosphate Bond Energy", em *Advances in Enzymology and Related Subjects*, Interscience Publishers, 1941, 99-162.
- <http://www.cienciahoy.org.ar/hoy27/atp.htm> (consultado em junho de 2012).
- <http://www.fade.up.pt/fisiologiageral/arquivo/bioenergetica.pdf> (consultado em junho de 2012).
- <http://www.ebah.com.br/content/ABAAAacacAC/conservacao-energia> (consultado em junho de 2012).
- http://www.unificado.com.br/novo/didatico/2_EM_RESP_CELULAR.pdf (consultado em junho de 2012).
- http://wiki.answers.com/Q/What_is_ATP (consultado em junho de 2012).
- http://www.ehow.com/facts_6727996_bond-between-ribose-atp.html (consultado em junho de 2012).
- <http://www.chemguide.co.uk/CIE/section111/learning1.html> (consultado em junho de 2012).
- <http://www.shapesense.com/fitness-exercise/articles/exercise-energy-systems.aspx> (consultado em junho de 2012).
- <http://users.rcn.com/jkimball.ma.ultranet/BiologyPages/A/ATP.html> (consultado em junho de 2012).
- <http://hypertextbook.com/facts/2000/Amberlqbal.shtml> (consultado em junho de 2012).
- http://www.newworldencyclopedia.org/entry/Adenosine_triphosphate

- (consultado em junho de 2012).
- [19] <http://www.livestrong.com/article/502849-phosphate-groups-glucose> (consultado em junho de 2012).
- [20] http://www.brooklyn.cuny.edu/bc/ahp/LAD/C7/C7_atp.html (consultado em junho de 2012).
- [21] <http://www.chacha.com/question/does-the-bonds-between-the-phosphate-groups-in-atp-store-large-amount-of-potential-energy> (consultado em junho de 2012).
- [22] <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK21737> (consultado em junho de 2012).
- [23] http://www.cliffsnotes.com/study_guide/Chemical-Reactions-in-Metabolic-Processes.topicArticleId-277792,articleId-277512.html (consultado em junho de 2012).
- [24] <http://www.bodybuilding.com/forum/galanis9.htm> (consultado em junho de 2012).
- [25] <http://www.shmoop.com/photosynthesis/terms.html> (consultado em junho de 2012).
- [26] <http://www.buzzle.com/articles/what-is-atp.html> (consultado em junho de 2012).
- [27] <http://tami-port.suite101.com/what-is-atp-a33529> (consultado em junho de 2012).
- [28] http://stockdale.kernhigh.org/SubWebs/teachers/keene/ch_outlines/Ch09PPT.pdf (consultado em junho de 2012).
- [29] <http://www.thedrugsafety.com/faq/ribose-atp> (consultado em junho de 2012).

ATUALIDADES CIENTÍFICAS

NANOTECNOLOGIA PARA ACELERAR A CICATRIZAÇÃO DE FERIDAS

Um grupo de cientistas na China desenvolveu um material capaz de reduzir o tempo necessário para curar uma ferida. Nos últimos anos têm sido desenvolvidos vários projetos de investigação para estudar as aplicações biomédicas promissoras do quitosano, uma molécula que consegue coagular o sangue de forma eficaz. Bingan Lu e colaboradores, da Universidade de Lanzhou, desenvolveram um método que permite combinar as propriedades benéficas do quitosano com o grafeno, um material constituído por átomos de carbono e para o qual tem sido demonstrado que possui atividade antibacteriana.

A equipa de investigadores misturou grafeno com nanofibras de quitosano-álcool polivinílico (PVA) usando eletrofiliação (um processo no qual é aplicada uma carga elétrica para formar fibras muito finas a partir de uma solução). Deste modo, as nanofibras de quitosano combinam-se com o grafeno, formando membranas finas. Essas membranas foram aplicadas em pequenas feridas na pele e, após 10 dias, as feridas tratadas com essa membrana apresentaram uma cicatrização significativamente superior àquelas que foram tratadas sem a membrana.

Para testar o potencial discriminatório do material desenvolvido foram também usadas culturas celulares e demonstrou-se que o grafeno é apenas prejudicial para as células bacterianas, enquanto que as células animais não são afetadas. Os cientistas sugerem que este facto pode ser devido à transferência de eletrões através da membrana celular, desencadeada pelo grafeno, que impedirá as células bacterianas de replicar, dado que os eletrões poderão alcançar o DNA bacteriano e destruí-lo. No caso das células animais isso não acontecerá porque o DNA se encontra protegido por uma segunda membrana (a membrana nuclear) e por isso não é afetado. No entanto, a equipa pretende investigar de uma forma mais aprofundada as propriedades antibacterianas do grafeno para confirmar o mecanismo.

(adaptado de <http://www.rsc.org/chemistryworld/News/2012/April/graphene-speeds-up-wound-healing.asp>)

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

O ANTIGO OCEANO DE MAGMA DE MERCÚRIO

Cientistas que analisaram os dados de fluorescência de raio-X recolhidos pela MESSENGER (Mercury Surface, Space ENvironment, GEochemistry, and Ranging), uma sonda da NASA que orbita o planeta Mercúrio desde março de 2011, identificaram dois tipos de composição bastante distintos das rochas da superfície do planeta. Deste modo, esta descoberta despoletou um enigma planetário: que processos geológicos teriam conduzido a estas diferenças tão significativas nas composições à superfície?

De forma a responder a esta questão, uma equipa do MIT usou os dados composicionais de modo a recriar os dois tipos de rochas em laboratório. Posteriormente submeteu cada rocha sintética a pressões e temperaturas elevadas de modo a simular diversos processos geológicos. Através destas experiências, a equipa verificou que os dados de composição dual apenas podem ser explicados por uma sequência de fenómenos específica: um vasto oceano de magma criou duas camadas de cristais, solidificou e depois eventualmente voltou a fundir em magma que irrompeu na superfície de Mercúrio.

“Dado que a crosta de Mercúrio tem provavelmente mais de 4 mil milhões de anos, o processo descrito teria de ser um fenómeno mesmo muito antigo”, afirma Timothy Grove, professor de geologia no MIT, que juntamente com o postdoc Bernard Charlier e Maria Zuber, professora de Geofísica e Ciência Planetária no MIT, publicou os resultados desta pesquisa no *Earth and Planetary Science Letters*. Larry Nittler, investigador no Carnegie Institution of Washington, que liderou a equipa que originalmente identificou os dois tipos de rochas a partir dos dados da MESSENGER, reconhece que os resultados experimentais da equipa do MIT propõem um cenário bastante provável para a explicação da história inicial de Mercúrio.

(adaptado do artigo de 21/02/2013: Mercury May Have Harbored an Ancient Magma Ocean: Massive Lava Flows May Have Given Rise to Two Distinct Rock Types, <http://www.sciencedaily.com/releases/2013/02/130221115808.htm>)

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

Submit Now!

ChemistryOPEN

is one of 11 journals of
ChemPubSoc Europe –
an organisation
comprising 16 European
chemical societies.

www.chempubsoc.eu

Editorial Advisory Board Chairmen:



Ramón
Martínez-Mañez,
Polytechnic University
of Valencia, Spain



Thomas Wirth,
Cardiff University, UK

Editorial Advisory Board Honorary Chairman:



Jean-Marie Lehn,
Nobel Prize winner in
chemistry in 1987,
Collège de France,
Paris / Univ. L. Pasteur,
Strasbourg, France



ChemistryOPEN
Including Thesis Treasury

1/2012
Open Access

The *first*
society-owned
open access
chemistry journal

Call for Papers

 WILEY-VCH
 WILEY Open Access

A Journal of



ChemPubSoc
Europe

www.chemistryopen.org

A journal of



ChemPubSoc
Europe

 WILEY Open Access

 WILEY-VCH

BOAS PRÁTICAS DE LABORATÓRIO: COMO SURGIRAM? O QUE SÃO? A QUE SE APLICAM?

CRISTINA GALACHO*

Neste artigo apresenta-se uma panorâmica geral sobre Boas Práticas de Laboratório (BPL) e os Princípios da OCDE de BPL, nomeadamente evolução histórica, definição, âmbito de aplicação, principais objetivos e legislação. Aborda-se o enquadramento legal das BPL em Portugal, as autoridades nacionais competentes para o seu acompanhamento e os trâmites do processo de certificação de acordo com os Princípios da OCDE de BPL. Referem-se ainda as Entidades Nacionais com certificação de conformidade na área dos Medicamentos e Produtos Cosméticos, e na área dos Produtos Químicos Industriais.

HISTORIAL

As Boas Práticas de Laboratório (BPL) surgiram pela primeira vez em texto legislativo, na Nova Zelândia, em 1972, e na Dinamarca, em 1973, com o objetivo de credibilizar a prática laboratorial no domínio da investigação e desenvolvimento [1-3].

Em 1976 surgiu a primeira proposta “formal” de regras de BPL (*Good Laboratory Practice Regulations: Proposed Rule*), como resposta a práticas incorretas verificadas pela agência norte americana FDA (do inglês *US Food and Drug Administration*) em atividades de investigação e desenvolvimento realizadas em laboratórios de companhias farmacêuticas e/ou laboratórios contratados pelas mesmas, nomeadamente, planeamento inadequado e execução incompetente de estudos, documentação insuficiente relativa a métodos e resultados e, em alguns casos, fraude.

Três anos mais tarde, em 1979, entrou em vigor a proposta final da FDA (*Good Laboratory Practice Regulations: Final Rule* 21 CFR 58), a primeira legislação com verdadeiro impacto internacional, tendo sido estabelecidas regras de BPL para que nos estudos de conceção e ensaio de um produto, no contexto do registo de novos fármacos, os resultados ob-

tidos fossem cientificamente válidos [1-6].

No domínio da Química, nomeadamente na área dos pesticidas, a agência de proteção ambiental norte americana EPA (do inglês *US Environmental Protection Agency*) deparou-se com problemas similares, publicando em 1983 as regras finais de BPL (40 CFR 160 e 40 CFR 792) [2, 4].

Um dos casos mais famosos e ilustrativo de falhas no domínio das práticas laboratoriais data de 1976, apesar de só ter sido notícia nos meios de comunicação social em 1983, e diz respeito aos Laboratórios Industriais Bio-Test, IBT (do inglês *Industrial Bio-Test Laboratories*). Os IBT, sediados em Illinois, eram, à data, responsáveis por mais de 20 000 estudos de segurança e eficácia de centenas de pesticidas e outros produtos químicos, o que correspondia a 35-40% do número total de estudos de toxicologia realizados nos Estados Unidos da América. As alegadas irregularidades cometidas por estes laboratórios incluíram a falsificação de dados, a reposição de animais que pereceram durante o estudo por animais novos (os quais não tinham sido tratados de forma apropriada com o composto teste) e sem documentação da substituição, produção de resultados e exclusão de resultados quando os mesmos poderiam não ser considerados favoráveis pelas autoridades oficiais. Estes laboratórios foram considerados culpados e os responsáveis foram devidamente punidos por defraudar o governo ame-

ricano em consequência da falsificação de resultados que serviram como suporte ao registo de pesticidas, cosméticos, produtos farmacêuticos de uso humano e animal, e de outras substâncias químicas [2, 4].

De entre as práticas incorretas realizadas constavam os estudos referentes ao glifosato¹, solicitados pela multinacional Monsanto, no sentido de satisfazer as exigências de registo. O IBT realizou cerca de 30 testes com glifosato e produtos à base de glifosato, inclusive 11 dos 19 estudos sobre toxicologia crónica. Um exemplo concreto da péssima qualidade dos dados do IBT está bem patente na declaração de um perito da EPA: “É difícil não duvidar da integridade científica de um estudo do IBT quando neste se afirma que foram retiradas amostras do útero (de coelhos machos) para exames histomorfológicos” [7].

As anomalias detetadas pela FDA e EPA, pondo em evidência o eventual risco para a saúde pela aprovação de novas substâncias destinadas a produtos farmacêuticos, pesticidas e outros produtos químicos com base em estudos incompletos, deficientes ou mesmo fraudulentos, foram indubitavelmente determinantes para a regulamentação e implementação das Boas Práticas de Laboratório.

A nível internacional, a Organização para a Cooperação e o Desenvolvimento Económico, OCDE, enunciou pela primeira vez em 1981 os Princípios de Boas Práticas de Laboratório

* Departamento de Química, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora
Centro de Química de Évora
E-mail: pcg@uevora.pt

como resultado do trabalho de um grupo internacional de peritos, desenvolvido entre 1979 e 1980, no âmbito de um programa sobre o controlo de produtos químicos [C(81)30(Final)]. Após 15 anos de aplicação com sucesso, devido ao progresso científico e técnico no campo dos testes de segurança e ao facto dos mesmos serem requeridos em muito mais áreas do que no final da década de 70 do século passado, os Princípios da OCDE de BPL foram revistos e atualizados, entre 1995 e 1996, por um novo grupo internacional de peritos (incluindo portugueses), e adotados no conselho da OCDE em 1997 [C(97)186(Final)] [3, 4, 8, 9].

A OCDE tem editados 15 documentos² relativos aos Princípios de BPL e verificação da conformidade e, ainda, 2 artigos de posição [9].

Em termos de legislação Europeia, a então CEE adotou, pela 1.^a vez, em 1986, a Diretiva do Conselho n.º 87/18/CEE, de 18 de dezembro, relativa à aproximação das disposições legislativas, regulamentares e administrativas respeitantes à aplicação dos Princípios BPL e ao controlo da sua aplicação para os ensaios sobre as substâncias químicas [10].

Em 1988 foi adotada a Diretiva do Conselho n.º 88/320/CEE, de 7 de junho, relativa à inspeção e verificação das BPL [11]. Posteriormente as mesmas foram revistas e alteradas, com base nos Princípios da OCDE de BPL (revisão de 1997), estando vigentes, respetivamente, as Diretivas 2004/10/CE e 2004/09/CE do parlamento Europeu e do Conselho, ambas de 11 de fevereiro de 2004 (versões codificadas) [8,12].

BPL E PRINCÍPIOS DA OCDE DE BPL: DEFINIÇÃO, ÂMBITO DE APLICAÇÃO E OBJETIVOS

Por BPL entende-se um sistema de qualidade relacionado com o processo de organização e as condições segundo as quais são planeados, executados, acompanhados, registados, arquivados e apresentados os resultados de estudos não clínicos³ de segurança para a saúde e ambiente [3, 8, 9].

Por sua vez, o termo “Princípios BPL” designa as BPL conformes com os Princípios da OCDE de BPL [12, 13]. Como tal, os Princípios da OCDE de BPL são constituídos por um conjunto de critérios normativos destinados ao estabelecimento do sistema de qualidade anteriormente referido e incluem os seguintes aspetos fundamentais:

- 1) Organização e pessoal da instalação de ensaio.
- 2) Programa de garantia da qualidade.
- 3) Instalações.
- 4) Equipamentos, materiais e reagentes.
- 5) Sistemas de ensaio.
- 6) Substâncias para estudo e de referência.
- 7) Procedimentos habituais de funcionamento.
- 8) Execução do estudo.
- 9) Elaboração de relatórios do estudo.
- 10) Armazenamento e conservação de registos e materiais.

O âmbito de aplicação dos Princípios da OCDE de BPL abrange os ensaios de segurança não clínicos de substâncias em estudo que entrem na composição de produtos farmacêuticos, pesticidas, cosméticos, medicamentos veterinários, bem como de aditivos alimentares, aditivos para alimentos de animais e produtos químicos industriais, visando a obtenção de dados, ainda não conhecidos, sobre as suas propriedades e/ou sobre a sua segurança para a saúde humana ou animal e/ou o ambiente. Estas substâncias são frequentemente produtos químicos sintéticos, mas podem também ser de origem natural ou biológica e, em algumas circunstâncias, organismos vivos.

Os estudos não clínicos de segurança para a saúde e o ambiente incluem trabalhos realizados em laboratórios, estufas e no terreno.

Exceto quando especificamente isentos pela legislação nacional, os Princípios da OCDE de BPL aplicam-se a todos os ensaios não clínicos de

segurança toxicológica, com reflexos na saúde humana ou animal e na qualidade ambiental, regulamentarmente exigidos para fins de concessão de licenças ou para registo dos produtos anteriormente referidos, bem como para regulamentação de produtos químicos industriais [3, 8].

Em última instância, o objetivo dos Princípios da OCDE de BPL é promover o desenvolvimento de dados e resultados de ensaio com qualidade. A possibilidade de comparação dos dados dos ensaios constitui a base para a sua aceitação mútua entre os países membros da OCDE. Se cada país puder confiar nos dados de ensaios desenvolvidos noutros países, é então possível evitar a duplicação de ensaios, poupando-se assim tempo e recursos. Adicionalmente, o reconhecimento mútuo dos resultados dos ensaios obtidos por utilização de métodos normalizados e reconhecidos é condição essencial para a redução do número de experiências executadas em animais, tal como disposto na Diretiva do Conselho n.º 86/609/EEC de 24 de novembro de 1986.

A aplicação destes princípios deve contribuir para evitar a criação de barreiras técnicas ao comércio e aumentar o nível de proteção da saúde humana e do ambiente [3, 8, 12].

PRINCÍPIOS DA OCDE DE BPL EM PORTUGAL

Em Portugal, o Decreto-Lei n.º 95/2000, de 23 de maio, transpõe para o ordenamento jurídico interno a Diretiva n.º 99/12/CE e estabelece as regras relativas à inspeção e verificação dos Princípios da OCDE de BPL. Por sua vez, o Decreto-Lei n.º 99/2000, de 30 de maio, transpõe para o ordenamento jurídico interno a Diretiva n.º 87/18/CEE, relativa à aplicação dos Princípios da OCDE de BPL e ao controlo da sua aplicação para os ensaios sobre as substâncias químicas, e a Diretiva n.º 99/11/CE, que adapta ao progresso técnico os princípios contidos naquela diretiva [3, 13].

Estes Decretos-Lei, DL n.º 95/2000 e n.º 99/2000, constituem a legislação nacional atualmente em vigor,

fazem referência direta aos Princípios da OCDE de BPL (revisão de 1997) e correspondem às disposições contidas nas diretivas 2004/9/CE e 2004/10/CE (versões codificadas).

As autoridades nacionais de acompanhamento competentes para avaliação e verificação da conformidade com os Princípios da OCDE de BPL são a Autoridade Nacional do Medicamento e Produtos de Saúde I.P., INFARMED, e o Instituto Português da Qualidade I.P., IPQ, conforme o disposto nos artigos 3.º do Decreto-Lei n.º 95/2000 e 6.º do Decreto-Lei n.º 99/2000 [3, 13, 14, 16, 17].

O INFARMED, Instituto Público integrado no Ministério da Saúde, foi criado em 1993 e é autoridade com atribuições nos domínios da avaliação, autorização, disciplina, inspeção e controlo de produção, distribuição, comercialização e utilização de medicamentos de uso humano, incluindo os medicamentos à base de plantas e homeopáticos, e de produtos de saúde (que incluem produtos cosméticos e de higiene corporal, dispositivos médicos e dispositivos médicos para diagnóstico *in vitro*) [15], estando-lhe atribuída a responsabilidade pelos assuntos respeitantes ao sistema BPL relativos a esta área [3, 13, 14].

Por sua vez o IPQ, Instituto Público integrado no Ministério da Economia e do Emprego, foi criado em 1985, e tem por missão, nos termos da sua lei orgânica aprovada pelo Decreto-Lei n.º 71/2012 de 21 de março, a coordenação do Sistema Português da Qualidade, SPQ, e de outros sistemas de qualificação regulamentar que lhe forem conferidos por lei, a promoção e a coordenação de atividades que visem contribuir para demonstrar a credibilidade da ação dos agentes económicos, bem como o desenvolvimento das atividades inerentes à sua função de laboratório nacional de metrologia [16, 18].

O Sistema Português da Qualidade congrega os subsistemas da normalização, da qualificação e da metrologia, sendo o IPQ o Organismo Nacional da Normalização e a Instituição Nacional de Metrologia [18]. No âmbito

do subsistema de metrologia foi-lhe atribuída a responsabilidade pelo acompanhamento do sistema de BPL na área dos outros produtos químicos e produtos para a proteção das plantas [3, 13, 14, 16-18].

O sistema de reconhecimento de laboratórios segundo os Princípios OCDE de BPL, gerido pelo INFARMED e pelo IPQ, em conformidade com o DL n.º 95/2000, de 23 de maio, segue os critérios estabelecidos na Diretiva 2004/9/CE.

A certificação de conformidade com as BPL é concedida a qualquer instalação de ensaio (laboratório) nacional, público ou privado, que pretenda declarar e aplicar as BPL e evidencie a conformidade com os Princípios da OCDE de BPL, tal como estabelecido no DL n.º 99/2000, de 30 de maio, realizando-se a avaliação tal como referido no anexo ao DL n.º 95/2000, de 23 de maio [14].

Os critérios gerais são complementados pelo conjunto de documentos orientadores editados pela OCDE e anteriormente referidos.

A tramitação do processo de certificação BPL decorre de acordo com o estipulado no Procedimento de Candidatura e no Programa Nacional de Acompanhamento BPL, programa nacional de verificação do cumprimento das BPL que assegura que as instalações de ensaio implementaram adequadamente os Princípios BPL para a execução dos estudos e estão em condições de garantir a qualidade adequada dos dados resultantes dos mesmos [17], cujos documentos se encontram disponíveis na página *web* do INFARMED [14].

Caso seja conferido o reconhecimento com os Princípios da OCDE de BPL é emitido, pela autoridade competente e ao abrigo do DL 95/2000 de 23 de maio, um certificado de conformidade válido por um período de dois anos renovável.

Atendendo ao facto do Programa Nacional de Acompanhamento de BPL estar reconhecido pela UE e pela OCDE, os dados gerados por instalações de ensaio do referido programa

serão aceites pela maioria das Autoridades Regulamentares de outros países, baseadas na decisão da OCDE de 12 de maio de 1981 de aceitação mútua de dados "OCDE MAD" [17].

Atualmente existem em Portugal cinco laboratórios com certificação de conformidade com os Princípios da OCDE de BPL, na área dos Medicamentos e Produtos Cosméticos, nomeadamente, o Laboratório de Estudos Farmacêuticos, LEF, o Labor Qualitas, a Unidade de Serviços Analíticos do Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica e do Instituto de Tecnologia Química e Biológica, ASU do IBET/ITQB, o Centro de Estudos de Farmacologia – AIBILI e o Laboratório de Investigação Farmacológica BIAL [14]. A título exemplificativo refiram-se:

- O LEF, entidade prestadora de serviços ao sector farmacêutico, assim como a outras áreas, tais como a alimentar e a de produtos cosméticos e de higiene corporal, cujo departamento bioanalítico possui certificação BPL/OCDE, concedida pelo INFARMED e pela ANVISA (Agência Nacional de Vigilância Sanitária, Brasil) [19];
- O Labor Qualitas, pólo de investigação e desenvolvimento do grupo Tecnimede, GTM, que é certificado pelo INFARMED, pelo IPAC para a norma NP EN/IEC ISO 17025 e também para as Boas Práticas de Fabrico, sendo um dos laboratórios a nível europeu com a capacidade técnica para análise e libertação de medicamentos. De acordo com o GTM, o compromisso com a excelência permitiu a conclusão com sucesso de mais de 80 produtos farmacêuticos para uso humano, que geraram, até à data, mais de 2000 autorizações de introdução no mercado a nível mundial [20];
- A Unidade de Serviços Analíticos, ASU, do Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica, IBET, e Instituto de Tecnologia Química e Biológica, ITQB, é certificada de acordo com os princípios OCDE de BPL pelo INFARMED. Refira-se que entre 2007 e 2010 esta unidade foi certificada simultaneamente pelo INFARMED e pelo IPQ [21].

No que respeita à área de Produtos Químicos Industriais, a SAPEC AGRO, S.A., é a única entidade reconhecida no Programa Nacional de Acompanhamento de BPL pelo IPQ [16, 22]. A obtenção de dados experimentais no âmbito de sistemas de qualidade de acordo com as BPL, necessários ao processo de registo de produtos fitofarmacêuticos, constitui um dos pilares da política de gestão do grupo SAPEC [22]. No âmbito dos Princípios da OCDE de BPL, a SAPEC AGRO tem certificados o Laboratório da Divisão Industrial de Investigação e Desenvolvimento (Laboratório Físico/Químico), a Unidade de Ensaio de Resíduos e o Laboratório de Resíduos [16, 22].

A título exemplificativo apresenta-se, na Figura 1, o Certificado de Conformidade do Laboratório BPL da Divisão Industrial de Investigação e Desenvolvimento da SAPEC AGRO, S.A., emitido pelo IPQ.

OUTRAS BOAS PRÁTICAS

Para além das BPL (GLP, do inglês *Good Laboratory Practice*), que têm como missão basilar aumentar o nível de proteção da saúde humana e do ambiente, existe uma grande panóplia de outras Boas Práticas como, por exemplo, Boas Práticas de Fabrico (GMP, do inglês *Good Manufacturing Practice*), Boas Práticas de Distribuição (GDP, do inglês *Good Distribution Practice*) e Boas Práticas Clínicas (GCP, do inglês *Good Clinical Practice*).

AGRADECIMENTOS

A autora agradece à Dr.^a Cristina Silva Oliveira do Grupo BPL - IPQ, à Dr.^a Mónica Galo do INFARMED, à Dr.^a Isabel Murta do ITQB-UNL e ao Eng.^o Pedro Vilas Boas da SAPEC AGRO, S.A., pela documentação enviada e esclarecimentos prestados, e ao(à) revisor(a) pelas sugestões/críticas efetuadas.

NOTAS

¹ O glifosato (N-(fosfonometil)glicina, C₃H₈NO₅P) é um herbicida pós-emergente classificado como não-seletivo e de ação sistémica. Apresenta largo

espectro de ação, o que possibilita o controlo de plantas daninhas anuais ou perenes [23].

Em 1970, o glifosato foi patenteado pela Monsanto e comercializado sob marca Roundup®. A partir de 2000, data em que expirou a referida patente, começou a ser produzido e vendido sob diferentes marcas registadas sendo, atualmente, um dos mais usados nos Estados Unidos da América.

Existe alguma controvérsia quanto aos possíveis efeitos tóxicos dos herbicidas que contêm glifosato, em termos de segurança ambiental e saúde humana, embora os mesmos sejam classificados, pela EPA, como levemente tóxicos (classe III) [23, 24].

² Documentos da OCDE relativos aos Princípios de BPL e Verificação da Conformidade [9]:

Princípios da OCDE de BPL:

N.º 1: Princípios da OCDE de BPL.

Documentos de Consenso:

N.º 4: Garantia da Qualidade e BPL;

N.º 5: Conformidade dos fornecedores de laboratórios com os Princípios de BPL;

N.º 6: Aplicação dos Princípios de BPL a estudos de campo;

N.º 7: Aplicação dos Princípios de BPL a estudos de curta duração;

N.º 8: Funções e responsabilidades do diretor do estudo de BPL;

N.º 10: Aplicação dos Princípios de BPL a sistemas informatizados;

N.º 13: Aplicação dos Princípios de BPL à organização e realização de estudos plurilocais.

Documentos de Orientação para as Autoridades de Verificação da Conformidade:

N.º 2: Guia revisto dos procedimentos de verificação da conformidade de BPL;

N.º 3: Guia revisto para a inspeção de laboratórios e auditoria dos estudos;

N.º 9: Guia para a preparação de relatórios de inspeção de BPL.

Documentos de Aconselhamento do Grupo de Trabalho BPL:

N.º 11: Funções e responsabilidades do patrocinador na aplicação dos Princípios de BPL;

N.º 12: Recomendações relativas ao pedido e realização de inspeção e de verificação dos estudos noutro país;

N.º 14: Aplicação dos Princípios de BPL a estudos *in vitro*;

N.º 15: Estabelecimento e controlo de arquivos que funcionam em conformidade com os Princípios de BPL.

³ Por estudo não clínico de segurança para a saúde e ambiente entende-se uma experiência ou um conjunto de experiências em que uma substância em estudo é analisada, em condições laboratoriais ou em ambiente normal, a fim de se obterem dados sobre as suas propriedades e/ou segurança, com vista à sua apresentação às autoridades regulamentares competentes [3, 8, 9].

REFERÊNCIAS

- [1] M. A. Anderson, *GLP Quality Audit Manual*, 3rd Ed. Interpharm/CRC Press, Florida, 2000.
- [2] J. P. Seiler, *Good Laboratory Practice – the Why and the How*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2005.
- [3] Decreto-Lei n.º 99/2000 de 30 de maio, *Diário da República - I Série-A*, N.º 125, 30 de maio de 2000.
- [4] UNDP/World Bank/WHO Special Programme for Research and Training in Tropical Diseases (TDR), *Handbook Good Laboratory Practice (GLP)*, 2000.
- [5] J. C. Marques, <http://www3.uma.pt/jc-marques/gmpglp.htm> (J. C. Marques GMP/GLP, acedido em 15-03-2012).
- [6] M. G. Slomiany, *The Indispensable Guide to Good Laboratory Practice (GLP)*, 2nd Ed., Pinehurst Press, Inc., New York, 2009.
- [7] C. Cox, *Journal of Pesticides Reform* **18** (1998), <http://www.mindfully.org/Pesticide/Roundup-Glyphosate-Factsheet-Cox2.htm> (Mindfully.org, acedido em 14-03-2012).
- [8] Directiva 2004/10/CE do Parlamento Europeu e do Conselho de 11 de fevereiro de 2004, *Jornal Oficial da União Europeia*, L 50/44-59. PT. 20.2.2004.
- [9] OCDE – Good Laboratory Practice (GLP), http://www.oecd.org/document/1/0,3746,en_2649_37465_48477249_1_1_1_37465,00.html (OCDE – Good Laboratory Practice (GLP), acedido em 14-03-2012).
- [10] Directiva 87/18/CEE do Conselho de 18 de dezembro de 1986, *Jornal Oficial das Comunidades Europeias*, N.º L 15/29-30, 17.1.87.
- [11] Directiva 88/320/CEE do Conselho de 9 de junho de 1988, *Jornal Oficial das Comunidades Europeias*, N.º L 145/35-37, 11.6.88.
- [12] Diretiva 2004/9/CE do Parlamento Europeu e do Conselho de 11 de feve-

reio de 2004, *Jornal Oficial da União Europeia*, L 50/28-42. PT. 20.2.2004.

- [13] Decreto-Lei n.º 95/2000 de 23 de maio, *Diário da República - I Série-A*, N.º 119, 23 de maio de 2000.
- [14] INFARMED – BPL, http://www.infarmed.pt/portal/page/portal/INFARMED/MONITORIZACAO_DO_MERCADO/INSPECCAO/LABORATORIO_CONTROLO_QUALIDADE (Autoridade Nacional do Medicamento e Produtos de Saúde I.P., acessado em 12-07-2012).
- [15] INFARMED - Sobre o INFARMED, http://www.infarmed.pt/portal/page/portal/INFARMED/PERGUNTAS_FREQUENTES/SOBRE_INFARMED (Autoridade Nacional do Medicamento e Produtos de Saúde I.P., acessado em 12-07-2012).
- [16] IPQ, http://www.ipq.pt/backhtmlfiles/ipq_mei.htm (Instituto Português da Qualidade, acessado em 12-07-2012).
- [17] Decreto-Lei n.º 71/2012 de 21 de março, *Diário da República - I Série*, N.º 58, 21 de março de 2012.
- [18] Programa Nacional de Acompanhamento de Boas Práticas de Laboratório. Instituto Português da Qualidade. Departamento de Metrologia. Fevereiro de 2012.
- [19] LEF, <http://www.lef.pt/00Home.aspx?lg=pt> (Laboratório de Estudos Farmacêuticos, acessado em 12-03-2012).
- [20] Labor Qualitas – Grupo TECNIMEDE, http://www.tecnimed.com/index.php?cat=31&id_empresa=47 (Labor Qualitas - Grupo TECNIMEDE, acessado em 12-03-2012).
- [21] ITQB, <http://www.itqb.unl.pt/facilities/Analytical%20Services/scientific-services/?searchterm=ASU> (Instituto de Tecnologia Química e Biológica (UNL) - Analytical Services Unit, acessado em 12-07-2012).
- [22] SAPEC AGRO, <http://www.sapecagro.pt/internet/empresa> (SAPEC AGRO, acessado em 28-06-2012).
- [23] Monsanto, <http://www.monsanto.com.br/produtos/herbicidas/roundup/> (Monsanto Herbicidas, acessado em 18-03-2012).
- [24] Wikipedia glifosato, http://es.wikipedia.org/wiki/Glifosato#cite_note-EPAusage-0 (Wikipedia glifosato, acessado em 21-03-2012).

Instituto Português da Qualidade

MINISTÉRIO DA ECONOMIA,
DA INOVAÇÃO E DO DESENVOLVIMENTO

PORTUGUESE INSTITUTE
FOR QUALITY
Rua António Gasto, 2
2829-513 Caparica
PORTUGAL

CERTIFICADO DE CONFORMIDADE

Número 03/BPL. 07

O INSTITUTO PORTUGUÊS DA QUALIDADE certifica que o

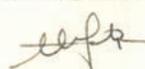
**Laboratório BPL da Divisão Industrial de Investigação e
Desenvolvimento da SAPEC Agro, S.A,**

Herdade das Praias
2901-852 Setúbal

É reconhecido para realizar ensaios físico-químicos para caracterização analítica das substâncias activas e das preparações de produtos fitofarmacêuticos, em conformidade com os "Princípios da OCDE das Boas Práticas de Laboratório – BPL", nos termos das Directivas 2004/9/CE e 2004/10/CE de 11 de Fevereiro, versão codificada.

O presente certificado, é emitido ao abrigo Decreto Lei n.º 95/2000 de 23 de Maio, é válido pelo período de dois anos renovável e substitui o anteriormente emitido em 18 de Julho de 2008.

Monte da Caparica, 12 Abril de 2010



J. Marques dos Santos
Presidente do Conselho Directivo

Certificado BPL- PNA- Produtos Químicos

Pág. 1 de 1

Figura 1 – Certificado de Conformidade com os Princípios da OCDE de BPL do Laboratório BPL da Divisão Industrial de Investigação e Desenvolvimento da SAPEC AGRO, S.A., emitido pelo IPQ



Sociedade
Portuguesa
de
Química

Continue connosco em 2013

Temos muito mais para si



ChemistryViews

Brought to you by



- The best chemistry content
- Exciting news, education, entertainment and multi-media
- Fast track to unique articles and 16 society platforms with the new online magazine



Spot your favorite content at

www.ChemistryViews.org



DESVENDAR OS SEGREDOS DAS “PEDRAS FERVENTES”. EXPERIÊNCIAS COM ZEÓLITOS AO NÍVEL DO ENSINO SECUNDÁRIO

NELSON NUNES* E ANGELA MARTINS

No presente trabalho são descritas três experiências laboratoriais que visam dar a conhecer as propriedades dos zeólitos. As atividades, direcionadas para os alunos do Ensino Secundário, abordam a aplicabilidade dos zeólitos em três vertentes: (i) como materiais adsorventes, com aplicação em processos de descontaminação de efluentes gasosos e de águas; (ii) como permutadores iónicos, fazendo parte da formulação de detergentes com a função de amaciamento de águas e (iii) como catalisadores heterogéneos, usados maioritariamente em processos de refinação e petroquímica, bem como em algumas reações de química fina.

INTRODUÇÃO

O nome zeólito foi dado há cerca de 250 anos a uma família de minerais cristalinos (aluminossilicatos hidratados) e teve a sua origem quando o mineralogista sueco Crönsted descobriu que certos minerais (pedras), quando aquecidos, pareciam “ferver”. O nome com que passaram a designar-se resulta da composição das palavras gregas *zeo* (ferver) e *lithos* (pedra).

Existe uma vasta bibliografia sobre zeólitos, maioritariamente publicada em língua inglesa. Existem também duas obras de referência editadas pela Fundação Calouste Gulbenkian e escritas em português: *Catálise Heterogénea* [1] e *Zeólitos, um nanomundo ao serviço da catálise* [2].

Ambas transmitem, de forma pedagógica e acessível, os conceitos básicos sobre zeólitos e suas propriedades, explorando as suas aplicações, com particular destaque para o seu papel como catalisadores. O autor comum nestas duas publicações é o recentemente falecido Professor Fernando Ramôa Ribeiro, pioneiro dos estudos sobre zeólitos em Portugal, cujo legado como professor, investigador ou orientador de numerosos alunos de mestrado e doutoramento, muito contribuiu para a divulgação das potencialidades destes materiais nas suas várias aplicações.

Os zeólitos podem ser divididos segundo a sua origem: naturais ou sintéticos. Os zeólitos naturais são normalmente encontrados em rochas vulcânicas ou metamórficas e o seu crescimento ocorre sob condições geológicas específicas (temperatura baixa e pH de 8-9). Inicialmente, estes materiais eram considerados apenas como curiosidades mineralógicas, mas, em 1925, foi descoberta no zeólito chabazite a propriedade de reter água e álcool etílico, mas não a acetona e o benzeno, surgindo daí a denominação “peneiros moleculares”, atribuída por McBain em 1932.

Apenas a partir de 1945 os zeólitos naturais foram utilizados de forma sistemática na purificação de misturas de gases, mas cedo se mostraram insuficientes para satisfazer investigadores e industriais. Assim, em 1948, surgiram os primeiros zeólitos sintéticos. A Associação Internacional de Zeólitos (*International Zeolite Association – IZA*), que classifica estes materiais, compilou o surpreendente número de

201 estruturas sintéticas (outubro de 2011), enquanto na natureza só foram encontrados menos de 50 [3].

Em Portugal existem alguns locais onde é possível observar zeólitos naturais. O local mais privilegiado situa-se num afloramento que se insere no Complexo Vulcânico de Lisboa, situado entre as praias da Samarra e Magoito, conhecido como Lomba dos Pianos. Atinge uma espessura de cerca de 20 m e abrange uma área com cerca de 3 km. O Maciço de Monchique, no Algarve, está também referenciado como um dos mais importantes da Europa [4-6]. A Figura 1 mostra algumas imagens de zeólitos naturais captadas em Portugal.

Alguns exemplares de zeólitos naturais portugueses e de outras origens podem também ser observados em alguns museus nacionais, como é o caso do Museu Alfredo Bensaúde ou do Museu de História Natural, onde também se encontra informação complementar.

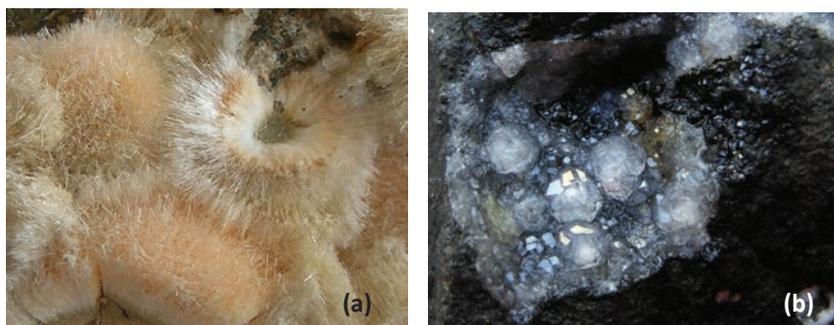


Figura 1 – Imagens de zeólitos naturais: Natrolite, $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, Lomba dos Pianos, Magoito, Sintra (a); Analcime, $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{12}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, Valejas, Oeiras (b); Imagens gentilmente cedidas por Rui P. Nunes [4]

* Área Departamental de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (ISEL), Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1950-007 Lisboa
E-mail: nnunes@deq.isel.ipl.pt

Do ponto de vista microscópico, os zeólitos apresentam-se sob a forma de pequenos cristais na ordem dos micra (1×10^{-6} m). A Figura 2 mostra imagens de microscopia eletrônica de varrimento (Scanning Electron Microscopy – SEM) de vários zeólitos com morfologias variadas, que vão desde cristais de forma cúbica (zeólito A), a placas alongadas (zeólito ZSM-5) ou a agregados em forma de folhas (zeólito MCM-22).

Quimicamente, os zeólitos são aluminossilicatos cristalinos constituídos por tetraedros de SiO_4 e AlO_4 , ligados entre si por átomos de oxigênio. A composição dos zeólitos pode ser expressa pela fórmula estrutural empírica: $[(\text{SiO}_2)_x(\text{AlO}_2)_y]M_{x/n}^{n+} \cdot w\text{H}_2\text{O}$, onde M representa um catião de valência n , usualmente alcalino ou alcalino-terroso, que é necessário para compensar a carga negativa da unidade que contém Al que é -1 [2, 3]. Assim, por

cada átomo de Al presente na estrutura, é necessário um catião de compensação a fim de preservar a sua eletroneutralidade, tal como se ilustra na Figura 3. Na natureza, a maioria dos zeólitos apresenta como catiões de compensação íons sódio (Na), designando-se assim o zeólito (Z) correspondente como estando na forma sódica ou NaZ. Estes catiões podem ser trocados ou permutados por outros catiões, nomeadamente NH_4^+ , ou H^+ , designando-se assim os zeólitos correspondentes por forma amônio, NH_4Z , ou forma protônica, HZ.

A estrutura resultante, que pode ser mono, bi ou tridimensional, surge em função do arranjo particular que se estabelece entre as unidades estruturais, com formação de canais e cavidades de dimensão e forma variáveis, consoante o número de átomos de oxigênio que formam as aberturas dos canais [1, 2]. Cada arranjo estru-

tural é característico de um determinado tipo de zeólito e recebe uma denominação comercial e um código de três letras maiúsculas atribuído pela IZA [3]. Os zeólitos são ainda classificados de acordo com a dimensão das aberturas dos poros: zeólitos de poros pequenos, se possuírem anéis com 8 átomos de oxigênio, de que são exemplo os zeólitos A (Figura 4a) e chabazite, de poros médios, quando têm anéis com 10 átomos de oxigênio, encontrando-se entre outros o zeólito ZSM-5 (Figura 4b), e de poros largos, quando são constituídos por anéis de 12 átomos de oxigênio, onde se encontra o zeólito Y (Figura 4c) e a mordenite.

O processo de síntese de zeólitos é relativamente simples e emprega reagentes acessíveis. De forma muito simplificada, consiste em dissolver uma fonte de alumínio e outra de silício em meio alcalino. Atendendo à basicidade do meio, todos os recipientes em contacto com o meio reacional deverão ser de polietileno ou polipropileno. Na bibliografia encontram-se alguns protocolos de síntese bastante detalhados, entre os quais se recomenda a consulta da publicação de carácter mais pedagógica de Blatter e Schumacher [8], onde se expõe de forma detalhada a síntese do zeólito Y. Alerta-se no entanto que a síntese por si só não garante a obtenção de um material cristalino de boa qualidade. É essencial a caracterização do material obtido por algumas técnicas nem sempre disponíveis, como por exemplo a difração de raios-X, pelo método dos póis, a adsorção de gases e a espectroscopia de infravermelho. A maior aplicação dos zeólitos é na fabricação de detergentes (70% em massa), onde são usados como amaciadores de águas, substituindo os fosfatos (tripolifosfato de sódio,

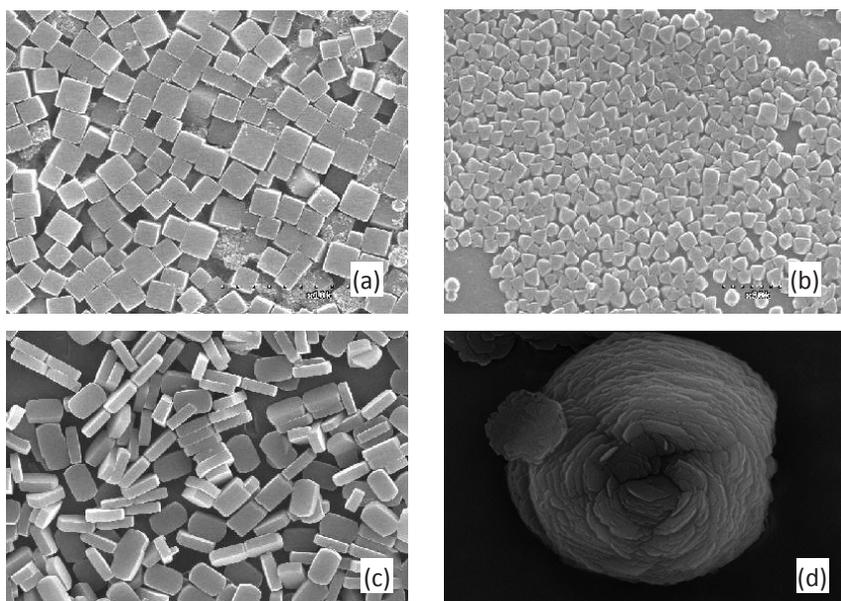


Figura 2 – Imagens de microscopia eletrônica (SEM) de zeólitos sintéticos: zeólito A (a); Y (b); ZSM-5 (c) [7]; MCM-22 (d); Dimensão dos cristais de 1 a 5 μm

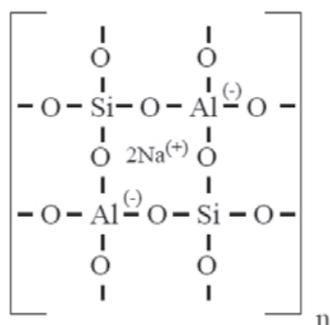


Figura 3 – Rede de tetraedros de um zeólito e respectivos catiões de compensação

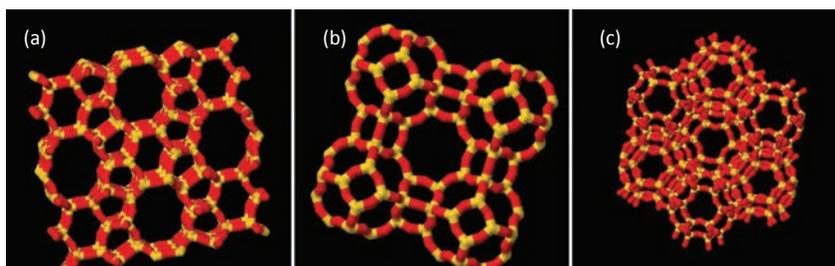


Figura 4 – Exemplos de estruturas de zeólitos: zeólito A (a); ZSM-5 (b) e Y (c) [3]

$\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$), que são compostos químicos nocivos para o meio ambiente, pois são responsáveis pela eutrofização de rios e lagos. Por outro lado, o facto dos zeólitos serem materiais microporosos, isto é, com canais e cavidades de diâmetro médio inferior a 2 nm, faz com que estes materiais consigam reter no interior dos seus poros moléculas e iões de tamanho igual ou inferior ao das aberturas dos poros, excluindo as que são maiores. Esta propriedade é responsável pela vasta utilização dos zeólitos como adsorventes em processos de separação, por exemplo em purificação de gases ou de efluentes líquidos.

As aplicações mais importantes dos zeólitos em termos de valor acrescentado são no domínio da catálise. Os zeólitos são os componentes principais da maioria dos catalisadores usados na refinação de petróleo e petroquímica, desempenhando um papel cada vez mais importante na síntese orgânica e no tratamento de efluentes gasosos. Estas e outras aplicações dos zeólitos têm impulsionado a pesquisa destes materiais a um ponto nunca antes imaginado pelos pioneiros nesta área. Atualmente, no Ensino Secundário, a temática dos zeólitos é abordada no Programa de Química do 12.º Ano, na Unidade de Combustíveis, Energia e Ambiente, mas a sua aplicação fica restrita ao papel de catalisadores na indústria de refinação e petroquímica [9]. Com este trabalho propõe-se um conjunto de experiências que visam dar a conhecer as propriedades únicas destes materiais numa perspectiva mais abrangente. Assim, na vertente da adsorção pretende-se demonstrar a capacidade dos zeólitos na retenção de moléculas. Ao exemplificar a capacidade de amaciamento de uma água pretende-se ilustrar a propriedade de permuta iónica dos zeólitos. Finalmente, a síntese de um éster sob a ação de um

catalisador ácido permitirá estabelecer a comparação entre um catalisador homogéneo, o ácido sulfúrico, e heterogéneo, o zeólito, evidenciando as características mais económicas e amigas do ambiente deste último, ao permitir a fácil recuperação e regeneração do catalisador. Este trabalho foi desenvolvido no contexto do programa de Ocupação Científica de Jovens nas Férias, promovido pela Ciência Viva, baseado num conjunto de trabalhos desenvolvidos anteriormente no laboratório de Química Física do ISEL. O baixo custo dos reagentes, o diminuto número de equipamentos envolvidos e a facilidade de execução laboratorial torna-o adequado para implementar em laboratórios de escolas do Ensino Secundário.

MATERIAIS USADOS NO ESTUDO

Os zeólitos são materiais relativamente baratos que podem ser adquiridos a fornecedores de reagentes químicos. Também podem ser pedidos diretamente a alguns fabricantes industriais, que produzem estes materiais na ordem das toneladas para várias indústrias. Neste estudo foi usada uma amostra de zeólito A (Linde type A zeolite, Fluka, BCR705) e um zeólito Y na forma sódica (Aldrich, 33 441-3), em pó e extrudidos. Na Figura 5 apresentam-se amostras de zeólito Y em duas formas: pó e extrudidos.

OS ZEÓLITOS COMO ADSORVENTES

O termo adsorção descreve o fenómeno no qual existe um maior número de moléculas retidas na superfície de um sólido do que no meio (líquido ou gasoso) que o rodeia. A elevada capacidade de adsorção dos zeólitos foi reconhecida desde muito cedo, sendo

aliás uma das suas primeiras utilizações conhecidas. Para demonstrar esta propriedade promoveu-se o contacto entre amostras de um zeólito Y na forma sódica, NaY, e soluções de ácido acético de diferentes concentrações. Assim, através da utilização de uma simples técnica de titulação ácido/base é possível estimar a capacidade de adsorção do zeólito.

Descrição da experiência

Preparar de forma rigorosa soluções de ácido acético com um intervalo de concentrações compreendido entre 0,010 e 0,30 M, partindo de uma solução padrão 1 M (recomenda-se um mínimo de 6 soluções). Pesar num vidro de relógio, usando preferencialmente uma balança analítica, amostras de cerca de 1 g de zeólito e transferir cada amostra para um erlenmeyer com tampa. Pipetar 100 mL de cada uma das soluções de CH_3COOH para os erlenmeyers onde se encontram as amostras de zeólito devidamente identificadas. Tapar os erlenmeyers e colocá-los sob agitação durante aproximadamente 15 minutos, para que se estabeleça o equilíbrio entre o zeólito e o ácido acético. De cada filtrado fazer três tomas de 25 mL, transferir para balões de titulação e titular com uma solução padrão 0,1 M de NaOH, usando fenolftaleína como indicador. Registrar o volume de titulante no ponto de viragem de incolor para carmim. Nesta experiência pode usar-se o zeólito sob a forma de pó ou extrudidos, sendo que no último caso as operações de pesagem e de recolha de amostras para titulação é mais facilitada.

Na Figura 6 ilustra-se o material/equipamento usado nesta experiência.

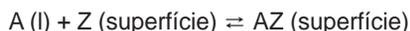


Figura 5 – Amostras do zeólito Y comercial nas formas de pó e extrudidos



Figura 6 – Material/equipamento usado na experiência de adsorção

Para estimar a capacidade de adsorção do zeólito, considera-se a existência de um estado de equilíbrio entre as moléculas de CH_3COOH em fase líquida (A) e o zeólito (Z):



O equilíbrio verifica-se quando a velocidade de adsorção (sentido direto) iguala a velocidade de desadsorção (sentido indireto). Pelos cálculos da titulação consegue determinar-se a concentração de equilíbrio de CH_3COOH . Este cálculo permite ainda determinar o número de moles de CH_3COOH retidas no zeólito, por diferença entre o número de moles presentes inicialmente nas soluções e o número de moles presentes nos filtrados. Na Figura 7 mostra-se a representação gráfica da quantidade adsorvida, normalizada à massa de zeólito, em função da concentração de equilíbrio de ácido acético. A capacidade de adsorção do zeólito pode estimar-se pela quantidade máxima de CH_3COOH adsorvida, isto é, pelo patamar da curva. A partir de um determinado valor de concentração de CH_3COOH , que varia consoante o tipo de zeólito usado, considera-se que toda a porosidade se encontra preenchida com moléculas de CH_3COOH .

Chama-se a atenção que a determinação da capacidade de adsorção de um zeólito por esta via constitui apenas uma estimativa que pretende ilustrar, com material corrente de laboratório, a propriedade de adsorção destes materiais. Considera-se desprezável

vel a reatividade do ácido acético com a superfície porosa do zeólito, desde que seja usado um zeólito na forma sódica [10]. Existem outras variantes de experiências de adsorção em fase líquida que podem ser consultadas na bibliografia mas requerem o uso de material e equipamento mais específico, como a adsorção de corantes acompanhada por espectroscopia na região espectral do visível com vista à remoção de corantes de efluentes provenientes de indústrias de tingimento [11].

OS ZEÓLITOS COMO PERMUTADORES IÔNICOS

A água da rede pública contém na sua composição quantidades variáveis de iões Ca^{2+} , Mg^{2+} e HCO_3^- . A concentração destes iões determina a “dureza da água”, sendo o Ca^{2+} a espécie dominante. A presença destas espécies na água, aliada às temperaturas usadas vulgarmente nos programas de lavagem (superiores a 30°C), leva à formação de depósitos sólidos sobre as resistências de aquecimento das máquinas de lavar, designados vulgarmente por calcário. Para colmatar este problema são adicionados aditivos aos detergentes, que têm por função remover estes iões por um processo chamado de “amaciação”.

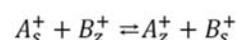
Até à década de 70 eram usados fosfatos (tripolifosfato de sódio $\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$), como aditivos, nos detergentes para amaciar a água de lavagem e permitir uma limpeza eficiente. No entanto, estes compostos químicos quando são

despejados em lagos e rios facilitam a proliferação de algas, que por sua vez matam os peixes e outras formas de vida, por um processo designado por eutrofização.

Em 1974, a Henkel (empresa alemã de produtos químicos) introduziu o zeólito A nos detergentes em substituição dos fosfatos, usando esta inovação tecnológica para lançar uma imagem ecológica. Mais tarde, em 1978, a empresa americana Procter & Gamble seguiu o exemplo e introduziu no mercado americano um novo produto que continha também zeólito A na sua composição substituindo, ainda que parcialmente, os fosfatos [12,13].

Atualmente, várias marcas de detergentes sólidos e líquidos no mercado Europeu contêm cerca de 15-30% em massa de zeólito. Apesar do zeólito A ainda predominar na maior parte dos detergentes, outras estruturas, como os zeólitos P e X têm vindo a ser utilizadas [12].

Como já foi referido anteriormente, os zeólitos possuem catiões de compensação a fim de garantirem a neutralidade da rede cristalina. Os catiões de compensação podem variar, no entanto, quer nos zeólitos naturais, quer nos sintéticos, os mesmos são geralmente as espécies Na^+ ou K^+ . Estes catiões podem ser trocados por outros que se encontram numa solução aquosa através de um processo designado por permuta iónica, que pode expressar-se de forma simplificada para catiões monovalentes pela equação seguinte [1]:



onde A é o catião a introduzir, designando-se por A_s se está em solução ou por A_z se está no zeólito e B é o catião presente originalmente no sólido, designado por B_z quando está em solução e por B_s quando passa para a solução.

A propriedade de permuta iónica é responsável pela maior utilização dos zeólitos: a indústria de detergentes. Assim, quando o detergente contendo o zeólito entra em contacto com a água de lavagem, os iões Na^+ ou K^+ que se encontram no zeólito são per-

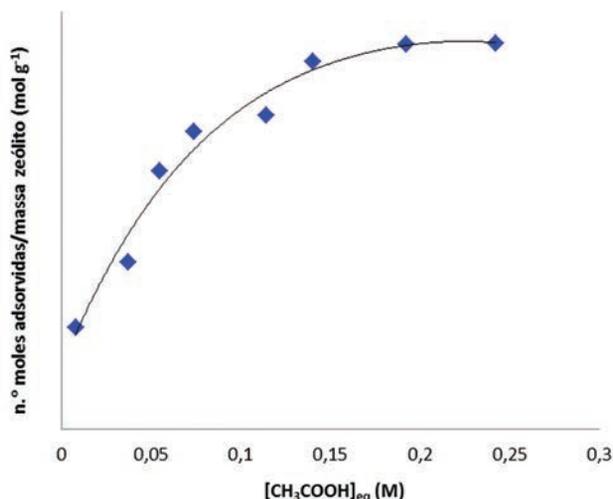


Figura 7 – Variação da quantidade adsorvida, normalizada à massa de zeólito, em função da concentração de CH_3COOH de equilíbrio

mutados pelos iões Ca^{2+} ou Mg^{2+} que se encontram na água de lavagem, Figura 8. Deste modo a concentração destes iões é reduzida, “amaciando” a água.

Sobre esta temática propõe-se uma experiência na qual se pretende avaliar a capacidade de amaciamento de um zeólito pela quantificação dos iões Ca^{2+} presentes numa água (considera-se que esta espécie se encontra em larga maioria) antes e após o contacto com uma amostra de um zeólito comercial. Também se pretende testar o comportamento de vários detergentes comerciais contendo zeólitos na sua composição [14].

Descrição da experiência

Parte I – Quantificação de Ca^{2+} numa água

A determinação da dureza da água efetua-se de modo simples por titulação complexiométrica dos iões Ca^{2+} com ácido etilenodiaminotetraacético (EDTA) na presença de um indicador [15]. A quantificação de Ca^{2+} pode ser feita numa amostra de água real. No entanto, para simplificar a experiência, sugere-se a preparação de uma solução 0,01 M de CaCl_2 usando água desionizada. Este procedimento, que em nada interfere com a interpretação dos resultados, evita a interferência de outros iões normalmente presentes na água comum.

Pipetar 25 mL da amostra de água para um erlenmeyer. Adicionar 1 mL de solução aquosa de NaOH 2 M (este procedimento é necessário, uma vez que as titulações com EDTA requerem meio básico). Adicionar uma pequena quantidade de indicador muxida. Titular com uma solução de EDTA 0,01 M até viragem de cor de vermelho para violeta.

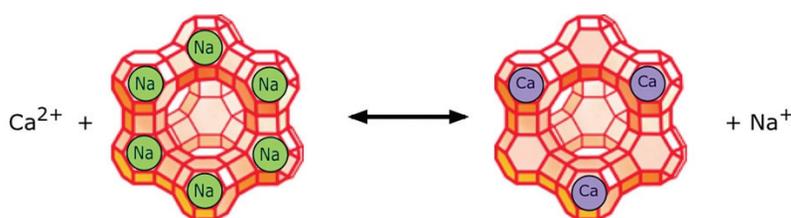


Figura 8 – Permuta iónica de Na^+ por Ca^{2+}

Parte II – Quantificação de Ca^{2+} numa água após contacto com um zeólito puro

Nesta parte da experiência pretende-se dar a conhecer a capacidade de troca iónica do zeólito puro, neste caso permuta de Na^+ por Ca^{2+} . Poderá usar-se qualquer zeólito, desde que os catiões de compensação sejam Na^+ (forma sódica) ou, menos comum, K^+ . Será no entanto mais interessante a utilização do zeólito A, pois é o mais usado na formulação de detergentes. Pesar rigorosamente 250 mg de zeólito e transferir para um erlenmeyer ou balão. Adicionar 100 mL de amostra de água e colocar sob agitação durante 15 min. Filtrar a suspensão de modo a remover o zeólito. Medir três tomas do filtrado para erlenmeyers e titular seguindo o procedimento anterior.

Parte III – Quantificação de Ca^{2+} numa água após contacto com um detergente contendo zeólito

Nesta parte da experiência repete-se o procedimento anterior, mas usando detergentes em pó comerciais contendo zeólitos na sua formulação, a fim de testar a sua capacidade de amaciamento. Os estudantes deverão ser convidados a testar o detergente que é costume usarem em casa, permitindo estudar o comportamento dos detergentes de diversos fabricantes, uma vez que as quantidades de zeólito adicionadas variam entre 15 a 30% em massa, consoante o fabricante. Informação mais detalhada sobre cada produto pode ser consultada nos *websites* dos respetivos fabricantes, conforme preconizado pela regulamentação da União Europeia (CE n.º 648/2004).

Numa primeira etapa, pesar 1 g de detergente em pó e transferir para um erlenmeyer ou balão. Adicionar 100 mL de amostra de água e colocar sob agi-

tação durante 15 min. A suspensão irá apresentar-se turva, pelo que é recomendável deixar repousar durante cerca de 24 h para medir três tomas de 25 mL do líquido sobrenadante, seguindo o mesmo procedimento de titulação descrito anteriormente.

A partir do volume de EDTA consumido em cada titulação, e atendendo a que a estequiometria M^{2+} : EDTA é de 1:1, pode facilmente calcular-se a quantidade de cálcio presente em cada alíquota. A quantidade de cálcio removida calcula-se por diferença entre a concentração de iões Ca^{2+} presentes inicialmente na amostra de água (Parte I) e após contacto com o zeólito (Parte II) ou detergente contendo zeólito (Parte III). A percentagem de zeólito presente em cada amostra de detergente pode ser estimada partindo dos cálculos efetuados para o zeólito puro, no entanto esta estimativa deverá ser feita com alguma reserva, pois o tipo de zeólito usado como puro e o que está presente nos detergentes podem não ter as mesmas características e, conseqüentemente, a capacidade de permuta ser diferente.

As condições reacionais descritas nas Partes II e III podem ser modificadas de modo a obter um maior leque de resultados. Sugere-se por exemplo a alteração da temperatura, usando como referência as temperaturas de lavagem habituais, permitindo assim estudar a influência deste parâmetro na cinética da permuta iónica.

Na Figura 9 mostra-se material/equipamento usado na experiência de quantificação de Ca^{2+} em amostras de água.



Figura 9 – Material/equipamento usado na quantificação de Ca^{2+} em amostras de água

OS ZEÓLITOS COMO CATALISADORES

A catálise heterogênea é a aplicação tecnológica mais importante dos zeólitos. Estes materiais atuam como catalisadores em reações de refinação de petróleo, sendo a mais importante o cracking catalítico, que consiste na quebra de ligações carbono-carbono nos hidrocarbonetos de peso molecular elevado para originar fragmentos mais leves e ramificados, que são os constituintes principais das gasolinas. Também atuam como catalisadores em reações de petroquímica, com a transformação de moléculas aromáticas que servem de base a várias indústrias químicas, como por exemplo a indústria dos polímeros. Também na química fina, onde se engloba a produção de corantes alimentares ou produtos farmacêuticos e cosméticos, o papel dos zeólitos como catalisadores é cada vez mais relevante [2].

Nesta atividade experimental preten- de-se ilustrar o papel de um zeólito como catalisador heterogêneo. Uma vez que a ocorrência da maior parte das reações que ocorrem na presen- ça de zeólitos requerem a presen- ça de centros ácidos de Brønsted, ilus- trados na Figura 10, o zeólito a usar deverá estar na forma protônica – HZ, como por exemplo HY, que são zeóli- tos comerciais relativamente fáceis de encontrar.

No caso do zeólito disponível estar na forma sódica, poderá passar à for- ma amônio por permuta iônica com uma solução aquosa de NH_4NO_3 2 M durante 6 h, sob refluxo, seguida de recuperação do pó por filtração, seca- gem em estufa e tratamento térmico a 300-400°C numa mufla a fim de re- mover o NH_3 e assim passar à forma protônica. Se a amostra estiver na forma NH_4Z basta fazer o tratamento

térmico, se já se encontrar na forma protônica pode usar-se diretamente.

A reação que se pretende realizar en- volve a formação de um éster a partir de um ácido carboxílico e um álcool (esterificação). Concretamente, pre- tende-se produzir etanoato pentílico (acetato de amilo), substância usada como aromatizante, a partir da reação entre ácido acético e 1-pentanol, na presença de um catalisador ácido, tal como se encontra esquematizado na Figura 11.

Para evidenciar as propriedades cata- líticas do zeólito, a experiência pode- rá ser realizada em paralelo, usando um catalisador homogêneo clássico, o H_2SO_4 , e um zeólito ácido [14].

Descrição da experiência

Num primeiro passo, introduzir 15 mL de ácido acético e 15 mL de 1-pen- tanol em dois balões de vidro com esmerilado (balão A e balão B). No balão A, onde a reação irá ocorrer na presença de um catalisador heterogê- neo, adicionar 2 g de zeólito HY. No balão B, onde a reação irá acontecer em meio homogêneo, adicionar 0,5 mL de H_2SO_4 concentrado.

Em seguida, adaptar condensadores de refluxo a cada um dos balões e le- var à ebulição durante 1 h usando uma placa ou manta de aquecimento. Após arrefecimento, filtrar a suspensão do balão A (o zeólito que se recupera pode ser reativado por aquecimento a 450°C e usado novamente). Colocar as soluções provenientes dos balões A (filtrado) e B em copos contendo 150 mL de água gelada. Transferir para ampolas de decantação e obser- var a separação de fases. O ácido e o álcool não convertidos dissolvem-se na água enquanto o éster produzido é imiscível. Transferir para provetas o éster proveniente da reação catalítica homogênea e heterogênea e com- parar os volumes obtidos pelas duas vias.

Na Figura 12a ilustra-se a montagem experimental usada na experiência. A separação de fases é visível na Figura 12b, onde a zona inferior cor- responde à fase miscível em água e a zona superior à fase não miscível.

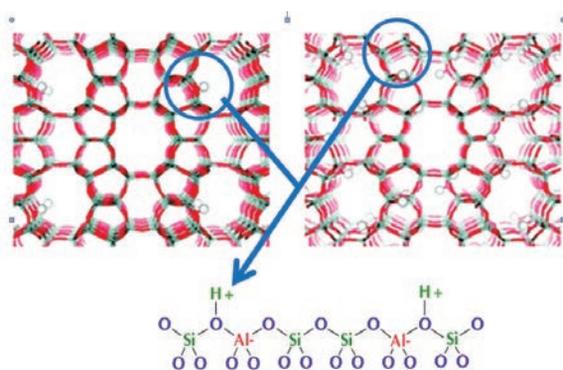


Figura 10 – Rede estrutural do zeólito, evidenciando os centros protônicos como cátions de compensação

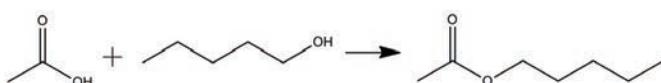


Figura 11 – Esquema reacional da reação de esterificação

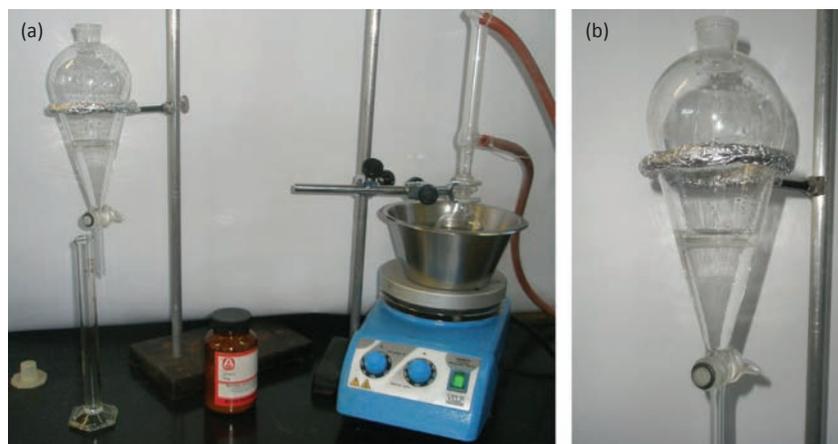


Figura 12 – Montagem de material/equipamento usada na experiência de catálise (a) e separação de fases na ampola de decantação (b)

Apesar do volume de éster obtido pela via heterogénea ser geralmente inferior ao obtido usando H_2SO_4 como catalisador homogéneo, deverá ser realçado que, enquanto o ácido é desperdiçado no final da reação, junto com a fase aquosa, o zeólito apresenta a vantagem de ser facilmente removido do meio reacional, podendo ser reciclado por aquecimento e novamente usado em posteriores ciclos reacionais. De notar que, usando diferentes álcoois e ácidos, a reação de esterificação pode ser também realizada obtendo evidentemente outros produtos finais. A escolha destes reagentes reflete unicamente a procura de uma etapa de separação entre regentes e produtos mais facilitada e, simultaneamente, a obtenção de um produto com características claramente distintas dos reagentes (neste caso o odor).

CONCLUSÃO

Com este conjunto de atividades espera-se fornecer aos alunos conhecimentos sobre zeólitos em três dos seus principais ramos de aplicação: adsorventes, permutadores iónicos e catalisadores heterogéneos. Do ponto de vista experimental, as atividades apresentadas são de simples execução, necessitando apenas de material básico de uso corrente de laboratórios escolares.

AGRADECIMENTOS

Os autores desejam agradecer:

- Prof. Celeste Serra, Presidente do Centro de Estudos de Engenharia

Química (CEEQ) do ISEL, pelo entusiasmo e incentivo à realização de Estágios de Ocupação de Férias da Ciência Viva no ISEL.

- André Sanches, EngeoWeb; Jorge Sequeira, Museu Geológico de Lisboa e Liliana Póvoas, Museu Nacional de História Natural, pelo interesse manifestado e cedência de informações sobre zeólitos naturais portugueses.
- Rui P. Nunes, pela cedência das fotografias de zeólitos naturais portugueses e informações dos melhores locais para os observar.

REFERÊNCIAS

- [1] J.L. Figueiredo, F. Ramôa Ribeiro, "Catálise Heterogénea" 2.ª Edição, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2007.
- [2] M. Guisnet, F. Ramôa Ribeiro, "Zeólitos, um Nanomundo ao Serviço da Catálise", Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2004.
- [3] Ch. Baerlocher, L.B. McCusker, Database of Zeolite Structures: <http://www.iza-structure.org/databases>, consultado em janeiro de 2012.
- [4] Rui P. Nunes' Mindat Home Page, <http://www.mindat.org/user-2474.html>, consultado em janeiro de 2012.
- [5] F. Gonçalves, "Subsídios para o Conhecimento Geológico do Maciço Erupativo de Monchique", Comunicações dos Serviços Geológicos de Portugal - Tomo LII, 16 pp, 1967.
- [6] E.J. González-Clavijo, V. Valadares, "O Maciço Alcalino de Monchique (SW português): Estrutura e Modelo de Instalação na Crosta Superior", Comunicações do Instituto Geológico e Mineiro, Tomo 90, pp. 43-64, 2003.
- [7] <http://hompi.sogang.ac.kr/zeolite/egall2.htm>, imagens SEM realizadas pelo Doutor Yun-Jo Lee, acedido em 27 de abril de 2012.
- [8] F. Blatter, E. Schumacher, "The preparation of pure zeolite NaY and its conversion to high-silica faujasite", Journal of Chemical Education, 67 (1990) 519-521.
- [9] <http://www.educacao.te.pt>, consultado em setembro de 2011.
- [10] E. Kukulska-Zajac, K. Góra-Marek, J. Datka, "IR and TPD studies of the reaction of acetic acid in zeolites NaHY", Microporous and Mesoporous Materials, 96 (2006) 216-221.
- [11] S. Wang, H. Li, L. Xu, "Application of zeolite MCM-22 for basic dye removal from wastewater", Journal of Colloid and Interface Science, 295 (2006) 71-78.
- [12] Zeolites for Detergents, as nature intended, Association of Detergent Zeolite Producers, CEFIC, January 2000.
- [13] Zeolite A, Technical report, Henkel KGaA, with the assistance of HERA Environmental Task Force and HERA Huamn Health Task Force, January 2004.
- [14] E.N.Coker, P.J. Davis, A. Kerkstra, H. van Bekkum, "Experiments with zeolites at the secondary-school level: Experience from the Netherlands", Journal of Chemical Education, 76 (1999) 1417-1419.
- [15] Água, Determinação do teor em cálcio, Norma NP-506, 1967.

ATUALIDADE CIENTÍFICA

CAPTURANDO O POTENCIAL DO DIÓXIDO DE CARBONO!

O dióxido de carbono é um problema. Como gás do efeito de estufa, contribui para o aquecimento global e as suas concentrações crescentes na atmosfera são citadas como a causa de alterações climáticas antropomórficas. Mas agora, uma equipa de investigadores da Universidade de Bath avançou com a ideia de usar o dióxido de carbono como matéria prima potencial para produção de combustíveis. Davide Mattia, que lidera a equipa de investigação, inspirou-se no processo de Fischer-Tropsh, que usa um catalisador de ferro para catalisar a reação entre hidrogénio e monóxido de carbono e produzir uma mistura de alcanos que pode ser usada como combustível. O catalisador de Mattia, que funciona com monóxido de carbono e com dióxido de carbono, é também baseado em ferro, tomando a forma de nanopartículas de ferro suportadas em nanotubos de carbono.

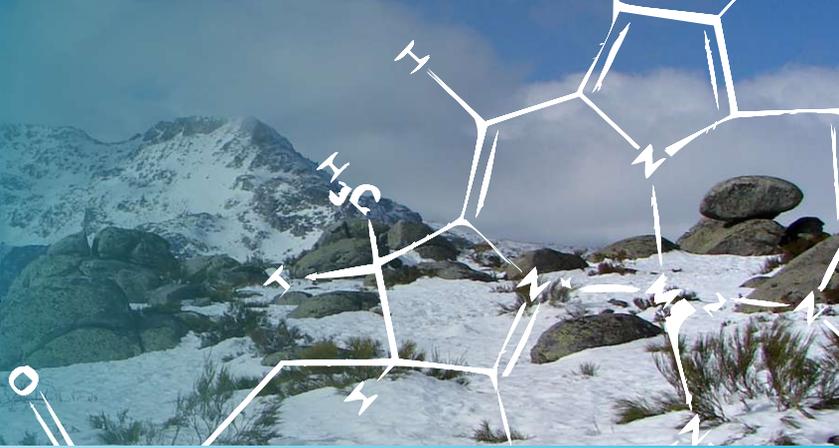
Mattia descobriu que quando o dióxido de carbono e o hidrogénio são alimentados ao processo, o hidrogénio adsorve preferencialmente nos nanotubos de carbono e o dióxido de carbono contacta com as nanopartículas de ferro, reagindo com o hidrogénio que apresenta uma elevada concentração na vizinhança, aumentando assim a eficiência na formação de hidrocarbonetos. Pensando no futuro, Mattia e a sua equipa planeiam agora tentar usar o calor que é libertado nos gases de escape de centrais de energia elétrica para alimentar o processo, de modo a tornar neutro o seu ciclo de carbono.

(adaptado de <http://www.rsc.org/chemistryworld/2013/02/iron-nanoparticle-co2-catalyst>)

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



UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR
Covilhã | Portugal



8^o Encontro Nacional de CROMATOGRAFIA

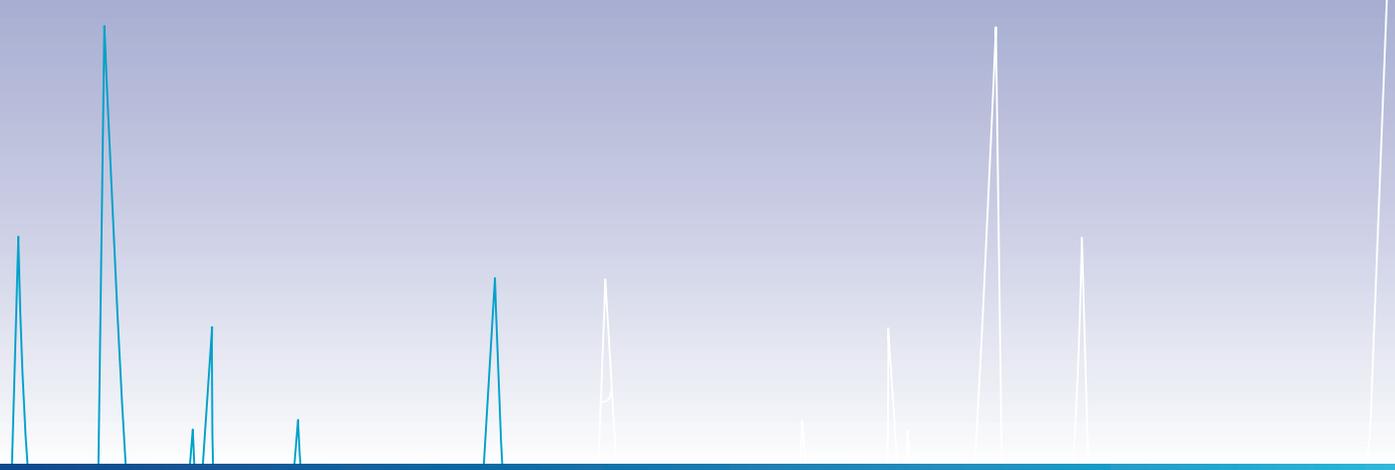
2, 3 e 4 de Dezembro | 2013

Faculdade de Ciências da Saúde | Universidade da Beira Interior | Covilhã

Mais Informações:

<http://8enc.eventos.chemistry.pt/>

enc2013@fcsaude.ubi.pt



Organização CICS



Centro de Investigação em Ciências da Saúde
Health Sciences Research Centre



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA
1911-2011
100 ANOS

SISTEMATIZAÇÃO DE ALGUMAS OCORRÊNCIAS DE RECURSOS EDUCATIVOS DIGITAIS PARA O ENSINO DA QUÍMICA

CARLA MORAIS E JOÃO PAIVA*

Sem termos o intuito de ser exaustivos, pretendeu-se fazer uma sistematização de algumas ocorrências de recursos educativos digitais disponíveis na Web – em particular simulações, animações e jogos educativos – potencialmente interessantes para o ensino da química no ensino básico e secundário.

INTRODUÇÃO

Os recursos educativos digitais (RED) resultantes da nossa pesquisa estão indicados nas tabelas que a seguir se apresentam nas quais, entre outras informações, se indica o(s) ano(s) de escolaridade no qual cada RED poderá ser integrado (tendo como referência o Currículo Nacional), a respetiva tipologia do RED, o idioma no qual se encontra, bem como a indicação sobre a existência (ou não) de restrições impostas pelos seus autores para a utilização e distribuição do mesmo.

Isto é, se os RED podem ser usados e distribuídos sem qualquer limitação nem indicação do autor (*Free*); se podem ser usados e distribuídos desde que sejam mantidos os créditos dos autores (Autor-utilização/distribuição livre), se, por sua vez, os recursos não podem ser distribuídos e a sua utilização está limitada ao *website* onde o próprio recurso se encontra alojado, como por exemplo acontece em algumas versões *demo* (Autor-utilização/distribuição limitada).

Faz-se também um exercício de apreciação dos RED, recorrendo-se à atribuição simbólica de estrelas, baseada em juízos de valor sobre as potenciais mais-valias da sua utilização para o ensino e para a aprendizagem da química. Com o intuito de facilitar a leitura da informação que se pretendeu

sistematizar, recorreu-se a algumas abreviaturas que julgamos aligeirarem a densidade do texto apresentado (Tabela 1).

RED SOBRE ESTADOS FÍSICOS DA MATÉRIA E PONTO DE FUSÃO E PONTO DE EBULIÇÃO

Numa primeira fase, começou-se por realizar uma pesquisa na internet usando as seguintes palavras-chave: *destilação fracionada, estados físicos da matéria, ponto de fusão e ponto de ebulição*. Além de acompanhadas pelos complementos: *simulação; digital; interação e software educativo*, as palavras-chave foram convenientemente traduzidas para língua inglesa e espanhola de modo a ampliar o raio de ação da nossa pesquisa.

Na Tabela 2 apresenta-se uma sistematização das ocorrências relacionadas com as palavras-chave indicadas.

Verificou-se que a maior parte dos RED encontrados estão disponíveis em língua inglesa e apresentam um baixo índice de interatividade com o utilizador tratando-se, na sua maioria, de animações computacionais que têm como principal propósito enfatizar determinadas características superficiais macroscópicas ou microscópicas não incluindo, necessariamente, valores teóricos ou empíricos de propriedades físicas e/ou químicas.

Alguns dos RED apresentados na Tabela 2 só se encontram disponíveis na sua versão *demo* (uma versão mais limitada), não sendo possível uma exploração mais completa dos mesmos.

RED SOBRE PRESSÃO DE UM GÁS, MOVIMENTOS CORPUSCULARES E CONDUTIVIDADE ELÉTRICA

Numa segunda fase da nossa pesquisa, lançou-se mão das seguintes palavras-chave: *pressão de um gás, iões, movimentos corpusculares e condutividade elétrica*, relacionadas com temáticas abordadas ao nível do 8.º ano de escolaridade. Na Tabela 3, apresentam-se os principais RED encontrados na senda da pesquisa realizada.

Relacionados com a temática das propriedades dos gases encontraram-se cinco simulações computacionais que permitem a manipulação de diferentes variáveis, sendo de sublinhar que duas delas se encontram em língua portuguesa – um, mais recente (data de 2011), resultou da tradução de uma versão originalmente desenvolvida em língua inglesa pela Universidade do Colorado.

Para a temática dos iões e da respetiva condutividade elétrica de soluções iónicas, foram escassos os recursos interativos encontrados.

Apenas se encontraram dois registos: um jogo sobre nomenclatura e fórmulas de compostos iónicos, em língua portuguesa, e uma simulação sobre a condutividade elétrica e a sua relação com a presença de iões em solução, em língua inglesa.

RED SOBRE TABELA PERIÓDICA E CONFIGURAÇÕES ELETRÓNICAS

Numa terceira fase da pesquisa realizada, usaram-se como palavras-chave

* Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
Unidade de Ensino das Ciências, Departamento de Química e Bioquímica
Centro de Investigação em Química
E-mail: jcpaiva@fc.up.pt

ve: *Tabela Periódica e configurações eletrónicas*.

Os resultados desta pesquisa apresentam-se na Tabela 4.

Sendo a Tabela Periódica uma importantíssima sistematização feita em Química, muitas foram as ocorrências de RED relacionadas com esta temática.

RED SOBRE OUTRAS TEMÁTICAS DE QUÍMICA GERAL

Além das pesquisas pautadas por critérios de especificidade temática, realizou-se também uma pesquisa

mais genérica, usando como palavras-chave: *simulação em química*, *software educativo em química* e *recursos interativos em química*, da qual resultou um vasto conjunto de RED, que julgamos apresentarem potencial científico e pedagógico para o ensino da Química, se devidamente integrados em contexto educativo.

Na Tabela 5, apresentam-se alguns exemplos destes recursos.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A sistematização apresentada reforça a ideia de que a produção de *software* deve ter em especial atenção a realização de recursos em língua

portuguesa, nas áreas e níveis disciplinares mais deficitários e que vão ao encontro dos interesses e motivações específicos dos jovens a quem se destinam. Da mesma forma, continuam a ser cruciais mais investigações sobre a integração pedagógica dos RED em contexto educativo com vista a potenciar, nos alunos, o desenvolvimento das mais diversas competências.

NOTA

Este artigo também está disponível no site da Sociedade Portuguesa de Química (<http://www.spq.pt/QUIMICA/multimedia>), onde os leitores poderão aceder diretamente às referências e recursos mencionados.

Tabela 1 – Abreviaturas utilizadas na sistematização de algumas ocorrências de RED

Ano de escolaridade	Tipo de RED	Idioma	Free vs Autor	Estrelas (apreciação qualitativa)
U – Passível de aplicação em anos de escolaridade superiores	S – Simulação	PT – Português	F – Free	Médio – ★★★
	A – Animação	PT-B – Português do Brasil	AF – Autor-utilização/distribuição livre	Bom – ★★★★
	H – Hipertexto	EN – Inglês	AL – Autor-utilização/distribuição limitada	Muito Bom – ★★★★★
	J – Jogo educativo	ES – Espanhol		

SOCIETATE PORTUGUESA DE QUÍMICA

1911-2011 10 ANOS

Visite-nos em www.spq.pt
e conheça a nossa história

História

Introdução

A fundação da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) em 28 de Dezembro de 1911 esteve intimamente relacionada com a publicação da Revista de Química Pura e Aplicada que surgiu pela primeira vez no Porto em 1905. Esta iniciativa foi levada a cabo por um pequeno grupo de cientistas portugueses, o mais ilustre dos quais terá, porventura, sido Ferreira da Silva que foi, também, o primeiro presidente da Sociedade.

Em 1915, a SPQ estava organizada em três secções, Porto, Coimbra e Lisboa. A secção do Porto incluía, desde essa data, uma sub-secção de Física, uma ciência que, em Portugal, ainda não tinha atingido a dimensão suficiente para possuir a sua própria sociedade. Devido à crescente importância da Física, em 1926 a SPQ passa a designar-se Sociedade Portuguesa de Química e Física, situação que durou até Fevereiro de 1974 quando esta se divide na Sociedade Portuguesa de Química e na Sociedade Portuguesa de Física. Contudo, só três anos mais tarde as duas sociedades encontrariam uma sede adequada para as suas actividades no 4º andar do nº 37 da Avenida da República em Lisboa. A cerimónia de inauguração teve lugar a 24 de Fevereiro de 1977 tendo contado com a presença, entre outros, do Secretário de Estado para a Investigação Científica, dos Reitores das Universidades de Lisboa e dos Presidentes do Instituto Nacional de Investigação Científica e da Fundação Calouste Gulbenkian. Os objectivos fundamentais da SPQ foram definidos durante esta cerimónia: a Sociedade deve constituir um centro de debate franco e livre sobre os temas de interesse da comunidade científica portuguesa cuja

Em 1981 a Sociedade...

ÁREA DE SAÍDA
ENTRAR
NOVO SÍMBOLO

EVENTOS
11th
International Conference on
Catalysis in Membrane Reactors

Tabela 2 – Sistematização de algumas ocorrências de RED relacionados com as palavras-chave: destilação fracionada, estados físicos da matéria, ponto de fusão e ponto de ebulição

Identificação do RED (consultado em setembro de 2012)	Temática abordada	Ano de escolaridade	Tipo de RED	Idioma	Free vs autor	Estrelas
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Propriedades dos sólidos, líquidos e gases</i> ▪ URL: http://www.skool.pt/content/los/chemistry/solids_liquids_gases/launch.html ▪ Ano: 2007 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Estados físicos da matéria 	7.º ano	A	PT	AF	☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Melting Point Simulation</i> ▪ URL: http://www.chemheritage.org/percy-julian/activities/melting_pt/melting_pt.html ▪ Ano: 2010 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ponto de fusão 	7.º ano	S	EN	AF	☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Boiling Point</i> ▪ URL: http://student.britannica.com/lm/labunits/activities/Unit_1/product.html ▪ Ano: 2008 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ponto de ebulição 	7.º ano 10.º ano - U	S	EN	AF	☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>States of Matter</i> ▪ URL: http://phet.colorado.edu/en/simulation/states-of-matter ▪ Ano: 2009 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Estados físicos ▪ Mudanças de estado físico ▪ Movimentos e agregação corpuscular 	7.º ano 8.º ano - U	S	EN	AF	☆☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>States of Matter</i> ▪ URL: http://www.harcourtschool.com/activity/states_of_matter ▪ Ano: s/d 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Estados físicos da matéria ▪ Movimentos e agregação corpuscular 	7.º ano 8.º ano	S	EN	AL	☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Cambios de estado</i> ▪ URL: http://concurso.cnice.mec.es/cnice2005/93_inicio_interactiva_materia/curso/materiales/estados/cambios.htm ▪ Ano: 2004 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Estados físicos ▪ Mudanças de estado físico ▪ Movimentos e agregação corpuscular 	7.º ano 8.º ano	A	ES	AF	☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Changing Matter</i> ▪ URL: http://www.bgfl.org/bgfl/custom/resources_ftp/client_ftp/ks3/science/changing_matter/index.htm ▪ Ano: 2007 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Estados físicos ▪ Mudanças de estado físico ▪ Movimentos e agregação corpuscular 	7.º ano 8.º ano	A	EN	F	☆☆☆☆

Tabela 3 – Sistematização de algumas ocorrências de RED relacionados com as palavras-chave: pressão de um gás, íões, movimentos corpusculares e condutividade elétrica

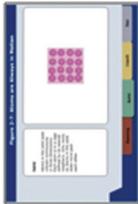
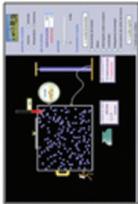
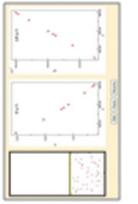
Identificação do RED (consultado em setembro de 2012)	Temática abordada	Ano de escolaridade	Tipo de RED	Idioma	Free vs autor	Estrelas
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Atoms are always in motion</i> ▪ URL: http://highereduc.wiley.com/legacy/college/olmsted/0471478113/simulations/simulations/animations/olmsc01animations_1_1.htm ▪ Ano: 2004 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Movimentos e agregação corpuscular 	8.º ano	A	EN	AL	☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Propriedades dos gases</i> ▪ URL: http://phet.colorado.edu/pt_BR/simulation/gas-properties ▪ Ano: 2011 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Propriedades dos gases 	8.º ano - U	S	PT/EN	AF	☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Pressão de um gás</i> ▪ URL: http://www.molecularium.net/pt/pressao/n/index.html ▪ Ano: 2005 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Propriedades dos gases 	8.º ano - U	S	PT	AF	☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Kinetic Molecular Theory: Pressure-Volume Relation</i> ▪ URL: http://www.chm.davidson.edu/vce/kineticmoleculartheory/pv.html ▪ Ano: 2001 - 2009 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Propriedades dos gases 	8.º ano - U	S	EN	AF	☆☆☆☆
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Electrolyte Solution Simulation</i> ▪ URL: http://antoine.frostburg.edu/chem/senese/101/kits/conductivitysimulation3.html ▪ Ano: 2005 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Íões ▪ Condutividade elétrica 	8.º ano - U	S	EN	AF	☆☆☆☆

Tabela 4 – Sistematização de algumas ocorrências de RED relacionados com as palavras-chave: Tabela Periódica e configurações eletrônicas

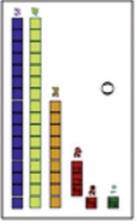
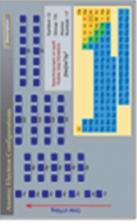
Identificação do RED (consultado em fevereiro de 2011)	Temática abordada	Ano de escolaridade	Tipo de RED	Idioma	Free vs autor	Estrelas
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: Tabela Periódica v2.5 ▪ URL: http://nautilus.fis.uc.pt/st2.5 ▪ Ano: 1999 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Tabela Periódica 	9.º ano - U	H/A	PT/EN	F	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: WebElements: the periodic table on the web ▪ URL: http://www.webelements.com ▪ Ano: 1993-2010 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Tabela Periódica 	9.º ano - U	H/A	EN	AL	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: Visual Elements Periodic Table ▪ URL: http://www.rsc.org/chemsoc/visualelements/pages/pertable_1fla.htm ▪ Ano: 2005 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Tabela Periódica 	9.º ano - U	H/A	EN	AL	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: Jogos sobre a Tabela Periódica ▪ URL: http://nautilus.fis.uc.pt/cec/jogostp ▪ Ano: 2003 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Tabela Periódica 	9.º ano	J	PT	AL	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: Electron Configurations ▪ URL: http://dwb4-unl.edu/ChemAnime/ECONFIG/ECONFIG.html ▪ Ano: 2001 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Distribuição eletrônica 	9.º ano - U	S	EN	F	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: Atomic electronic configurations ▪ URL: http://www.oneonta.edu/faculty/viningwj/sims/atomic_electron_configurations_s1.html ▪ Ano: 2003 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Distribuição eletrônica 	9.º ano - U	A	EN	F	★★★★★

Tabela 5 – Sistematização de algumas ocorrências de RED relacionados com as palavras-chave: simulação em Química, software educativo em Química e recursos interativos em Química

Identificação do RED (consultado em setembro de 2012)	Temática abordada	Ano de escolaridade	Tipo de RED	Idioma	Free vs autor	Estrelas
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Molecularium: simulações em Química-Física</i> ▪ URL: http://www.molecularium.net ▪ Ano: 2008 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Várias 	Vários	S	PT	AF	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Interactive Simulations</i> ▪ URL: http://phet.colorado.edu/en/simulations/category/chemistry ▪ Ano: (vários, desde 2008) 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Várias 	Vários	S	PT/EN	AF	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Chemistry Experiment Simulations and Conceptual Computer Animations</i> ▪ URL: http://www.chem.iastate.edu/group/greenbowe/sections/projectfolder/simDownload ▪ Ano: 2005 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Várias 	Vários	S	EN	AF	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Absorb Chemistry</i> ▪ URL: http://www.absorblearning.com/media/search.action#search ▪ Ano: 2005 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Várias 	Vários	S/A	EN	AF	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Spectral series of hydrogen</i> ▪ URL: http://www.bigs.de/en/shop/anim/termsch01.swf ▪ Ano: 2005 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Espetros 	10.º ano	S	EN	AF	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Animação "Le Chatelier's Principle"</i> ▪ URL: http://www.mhhe.com/physci/chemistry/essentialchemistry/flash/tehv17.swf ▪ Ano: 2001 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Princípio de Le Chatelier 	11.º ano	S	EN	AL	★★★★★
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Título: <i>Titulação ácido-base</i> ▪ URL: http://users.skynet.be/eddy/titratie.swf ▪ Ano: 2003 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Titulações ácido-base 	11.º ano	S	EN	AF	★★★★★

“QUAL É O MELHOR COMBUSTÍVEL?”

MÓDULO INQUIRY PARA O ESTUDO DAS ENTALPIAS DE COMBUSTÃO

RAUL ALONSO¹ E CARLA MORAIS^{2,*}

Este módulo *inquiry* foi adaptado a partir do módulo PARSEL já existente e disponível em <http://www.parsel.uni-kiel.de/cms/index.php?id=76>. Foi otimizado para ser aplicado no 12.º ano de escolaridade, mas com pequenas adaptações poderá ajustar-se ao 11.º ano ou mesmo em módulos do ensino profissional. Uma vez que o estudo das entalpias das reações se constitui como uma temática complexa para a maioria dos alunos, pretendeu-se facilitar a construção de conhecimentos científicos e ao mesmo tempo procurar que o estudo levasse à tomada de decisões e incremento do espírito crítico. Com o desenvolvimento deste módulo *inquiry* foi também possível incluir implicitamente duas atividades práticas obrigatórias do programa de Química do 12.º ano (APL 2.4 e 2.5) [1].

A questão problema, que simultaneamente se constituiu como o título do módulo, e que deu início ao desenrolar da atividade, é propositadamente muito vaga, pois pretendeu-se provocar uma reflexão sobre o(s) significado(s) que uma mesma palavra pode ter na sua utilização quotidiana e no contexto da ciência. Este objetivo poderia ser atingido de várias formas, por exemplo pela realização de um conjunto de tarefas sugeridas pelo professor, através de tarefas meramente demonstrativas, pela elaboração de um trabalho de pesquisa/investigativo teórico ou através de uma atividade investigativa com componente laboratorial. Foi esta última hipótese a escolhida, pois é a que mais comunga da perspetiva de abordagem pedagógica baseada na *Inquiry-Based Science Education (IBSE)* [2] e a que poderá promover um maior envolvimento dos alunos na indagação e construção do seu co-

nhecimento. Em ciências é essencial que teoria e prática convirjam [3].

Partindo do cenário motivador, relacionado com o uso evidente de diferentes combustíveis na sociedade atual, procurou-se em primeiro lugar que os alunos definissem, grupo a grupo, os seus próprios objetos de estudo, através de um *brainstorming*. Primeiro em grupo e posteriormente com toda a turma, verificou-se que este momento de reflexão e partilha foi muito útil, pois ajudou a sedimentar ideias para procurar investigar e realizar uma atividade laboratorial em segurança que conduzisse à resolução do problema de acordo com os diferentes parâmetros: custo, quantidade, rapidez, facilidade de manipulação, abundância, durabilidade, poluição e mesmo tipo e quantidade dos combustíveis selecionados. Muitas questões pertinentes foram aparecendo e sendo respondidas ao longo do processo, mormente as relacionadas com o controlo das variáveis a considerar, tanto do próprio combustível, como das condições da substância a aquecer, assim como as grandezas a medir, a montagem laboratorial mais adequada e os instrumentos de medida possíveis de serem utilizados na sala de aula. Tanto na procura de respostas para as suas suposições, como na apresentação de resultados, cada grupo consultou fontes externas, nomeadamente aplicações informáticas e simulações que se encontram na *internet*, utilizando as tecnologias emergentes no desenvolvimento do processo, de acordo com o IBSE [4].

Esta abordagem mais interativa, por oposição a um ensino transmissivo tradicional, implica um maior investimento do professor e dos alunos, mas pareceu-nos que os ganhos de aprendizagem, no sentido lato do termo, foram evidentes pela análise do trabalho realizado e também pelos conhecimentos demonstrados posteriormente em exercícios escritos. Apesar

do tema em estudo ser comum a todos os intervenientes, foi visível que a abordagem de cada grupo teve *nuanças* que o diferenciaram. Tal foi muito interessante, pois os alunos constituíram-se como verdadeiros atores do processo científico, o que promoveu um desenvolvimento muito maior do espírito crítico do que nas atividades laboratoriais comuns. Isto comprovou que promovendo verdadeiras experiências de compreensão, se pode conseguir a “ressonância”, que corresponde a experiências emocionais de referência que consolidam aprendizagens [5].

Por fim, pensamos ser de todo o interesse levar os alunos a mostrar os resultados das “suas investigações” à comunidade através de mostras de ciência e elaboração de *posters* científicos, permitindo tal o desenvolvimento de outras competências e interesse na área da divulgação científica.

REFERÊNCIAS

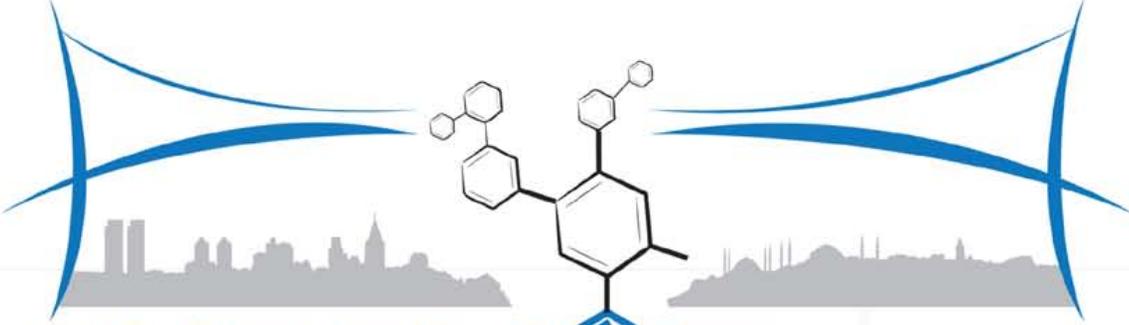
- [1] Martins, et al (2004). *Programa de Química 12.º Ano - Curso Científico-Humanístico de Ciências e Tecnologias*. Direção Geral de Inovação e de Desenvolvimento Curricular, Ministério da Educação, Lisboa.
- [2] Branch, J., Oberg, D. (2004). *Focus on inquiry: a teacher's guide to implementing inquiry-based learning*. (pp. 1-5) Alberta, Canada: Alberta Learning.
- [3] Woolnough, B., Allsop, T. (1985). *Practical Work in Science*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [4] Thier, H. D. (2000). *Developing Inquiry-Based Science Materials: A Guide for Educators*. New York: Teachers College Press, Columbia University.
- [5] Olenick, R. P. (2005). *Stop I can't Fit Anything More Into My Head: How Students Learning Physics*. NSTA High School Breakfast Talk. NSTA Annual Conference, Dallas.

¹ Escola Secundária D. Afonso Henriques

² Faculdade de Ciências da Universidade do Porto
Departamento de Química e Bioquímica
Unidade de Ensino das Ciências

Centro de Investigação em Química

* E-mail: cmorais@fc.up.pt



TURCMOS 2013

I. International Turkish Congress on Molecular Spectroscopy

September 15-20, 2013 / Istanbul / Turkey
Harbiye Cultural Center & Museum

Topics

The congress will include the scientific topics below:

1. Vibrational (IR and Raman) and Electronic Spectroscopies
2. Electron Spin Resonance (ESR) Spectroscopy
3. Mössbauer Spectroscopy
4. Fluorescence Spectroscopy
5. Microspectroscopy and Imaging
6. Surface Enhanced Raman Spectroscopy (SERS)
7. Microwave Spectroscopy
8. Terahertz Spectroscopy
9. Applied Spectroscopies (Archaeology, Geology, Astrophysics, Mineralogy, Arts & History, Environmental Analysis, Food Analysis and Processing, Applications on Biology, Forensic Sciences)
10. Matrix Isolation Infrared Spectroscopy and Low Temperature Spectroscopy
11. Theoretical and Computational Methods
12. Analytical Methods and New Instrumentation
13. Spectroscopy in Drug Design and Drug Discovery
14. New Materials (Nanostructured and Supramolecular Systems, Molecular Electronics and Optoelectronics, Magnetic Materials)

Organizing Committee:

Ozan ÜNSALAN

(Istanbul University, TURKEY), **President**

Gülce ÖĞRÜÇ ILDIZ

(Istanbul Kültür University, TURKEY), **Vice President**

Baki AKKUŞ

(Istanbul University, TURKEY), **Honorary President**

Metin ORBAY (Amasya University, TURKEY)

Sevgi H. BAYARI (Hacettepe University, TURKEY)

Semiha BAHCÉLİ (Süleyman Demirel University, TURKEY)

Ömer DERELİ (Selçuk University, TURKEY)

Ayberk YILMAZ (Istanbul University, TURKEY)

Olca BÖLÜKBAŞI (Istanbul University, TURKEY)

Yusuf ERDOĞDU (Ahi Evran University, TURKEY)

Erol EROĞLU (Akdeniz University, TURKEY)

Nihal KUŞ (Anadolu University, TURKEY)

Sevgi TATAR ULU (Istanbul University, TURKEY)

Hasan H. ESENOĞLU (Istanbul University, TURKEY)

Özgecan ÖNAL (Istanbul University, TURKEY)

Özge HASKAYA (Istanbul University, TURKEY)

Çağlar ÇETINKAYA (Istanbul University, TURKEY)

Şehin ÖZBALAK (Istanbul University, TURKEY)

Mercan ASLAN (Istanbul University, TURKEY)

Esra BÜLÜN (Istanbul University, TURKEY)

Invited Speakers:

Sir, Harold Walter KROTOSCHINER*

(NOBEL-1996, CHEMISTRY) (Honorary guest)

Walter KOHN

(NOBEL-1998, CHEMISTRY) (Honorary guest)

Peter PULAY

(Texas Austin University, USA) (Honorary guest)

Rui FAUSTO

(Coimbra University, PORTUGAL)

James DURIG

(University of Missouri-Kansas City, USA)

Evert Jan BAERENDS

(Amsterdam University, HOLLAND)

Michael OSHTRAKH

(Ural State Technical University, RUSSIAN
FEDERATION)

Juergen POPP

(Institute of Photonic Technology, GERMANY)

Wolfgang KIEFER

(University of Würzburg, GERMANY)

Maral SÜNNETÇIOĞLU

(Hacettepe University, TURKEY)

*awaiting last confirmation

Abstract Submission Deadline:
31 MAY 2013

Early Bird Registration Deadline:
31 MAY 2013

ORGANIZATION SECRETARIAT



Halaskargazi Cad. Tavukçu Fethi Sok. Köşe Palas Apt. No: 28/3 Osmanbey - Şişli - İstanbul
Tel: +90 (212) 296 66 70 pbx / Fax: +90 (212) 296 66 71
aydan.aydin@brosgroup.net / www.brosgroup.net

www.turcmos2013.org

Módulo *inquiry*

“Qual é o melhor combustível?”

Atividades para o aluno

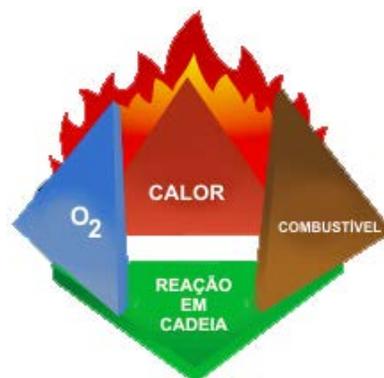
Contextualização/Cenário (Ler, Refletir, Questionar)

Todos os dias nos *media* somos confrontados com o escalar do preço do petróleo e é inevitável, na televisão, ver pontos de reportagem a partir de postos de abastecimento, falando no aumento do preço da gasolina e do gasóleo.

Qual é a razão da importância atribuída a estes combustíveis? Serão estes os melhores combustíveis?

A civilização sempre precisou de combustíveis para cozinhar, para se aquecer e, frequentemente, para assegurar a sua proteção contra os predadores. Mas foi apenas com a tecnologia moderna que uma gama de combustíveis muito variada passou a ser acessível à maioria dos cidadãos.

A Ana, uma estudante de Química, começou a pensar que sendo nós cidadãos cientificamente responsáveis, não será suficiente identificar os diversos combustíveis adequados a um determinado fim, mas que será também muito importante determinar qual o “melhor” combustível. Ajudem a Ana a planear uma investigação que lhe permita decidir qual é o “melhor combustível”.



Tetraedro do fogo
(fonte: <http://www.areaseg.com/fogo>)

Tarefas a realizar

A- *Brainstorming* (em grupos de trabalho)

1. Leiam o cenário e definam “combustível”.
2. Sugiram a forma mais adequada para definir “melhor combustível”, de acordo com os parâmetros entendidos como pertinentes para esta caracterização.
3. Através de um porta-voz discutam as ideias (previamente registadas dentro do grupo) com a turma sob moderação do professor (registando todos os combustíveis mencionados e os parâmetros de caracterização).

B- Atividade de pesquisa, recolha e experimentação

1. Escolham, ponderadamente, o conjunto de combustíveis que vai ser alvo de estudo pelo grupo, na tentativa de responder à questão inicial (entre 4 e 6 combustíveis).
2. Planeiem uma atividade experimental na qual cada combustível é usado para aquecer algo (sugere-se água).
3. Cada grupo é responsável pela recolha e transporte (em segurança) dos combustíveis escolhidos.
4. A atividade experimental deve ser otimizada tendo em conta os materiais e aparelhos laboratoriais presentes na escola, ou trazidos pelo grupo.
5. Cada vez mais devemos estar atentos às implicações de cariz ambiental. Procurem ter esta temática em conta no desenvolvimento do vosso trabalho.
6. É crucial pensar bem nas variáveis a controlar durante a experiência, por isso deve ser discutida pormenorizadamente a forma de implementação e de registo dos resultados.
7. Depois de o professor (e só nesse caso) concordar com a montagem, realizem a experiência.
8. Caso seja necessário, fazer ajustes, alterar o plano da experiência e repetir os passos indispensáveis (só após o professor dar aval a essa alteração).
9. Com base nos dados recolhidos, calculem as grandezas necessárias e comparem os combustíveis usados.

C- Pós experiência

1. Elaborem uma apresentação a ser realizada de forma sintetizada à turma (em não mais do que 15 minutos) sobre o processo e discutam qual destes combustíveis é o “melhor”, tendo em consideração o ponto de vista social, bem como o ponto de vista científico.
2. Elaborem um relatório da atividade que inclua, caso se justifique, alterações que achem pertinentes efetuar num possível novo estudo de forma a melhorar a exatidão do mesmo.
3. Elaborar um *poster* e uma apresentação que inclua materiais para uma “Mostra de Ciência” (**opcional**).

Módulo inquiry
"Qual é o melhor combustível?"
Notas complementares para o professor

Introdução

O desenvolvimento e a aplicação dos módulos *inquiry* visa a promoção da **literacia científica** pela **aprendizagem significativa** em dois domínios principais: a) desenvolvimento cognitivo, pessoal e social e b) processo e natureza da Ciência. Com vista a contribuir para a popularidade e relevância das aulas de ciência, nestes módulos a abordagem parte, intencionalmente, de um **fenómeno real do quotidiano** e orienta-se para a ciência tentando por esta via, aproximar-se das necessidades específicas de aprendizagem dos alunos.

Estrutura

Os módulos *inquiry*:

1. Apresentam o título e o cenário (baseados num assunto social), suportados no guia do aluno.
2. Colocam a sua ênfase centrada no aluno, na resolução de problemas científicos, interligando a aprendizagem num contexto de objetivos educacionais e científicos.
3. Incluem tomadas de decisão científico-sociais relacionando os conhecimentos científicos adquiridos com necessidades sociais, incluindo a cidadania responsável.

Objetivos/Competências/Metas:

1. Perceber a importância da determinação da entalpia de combustão de diferentes compostos e conceitos inerentes.
2. Investigar dados em diferentes fontes para apoio à resposta a um problema concreto.
3. Projetar e executar uma experiência laboratorial com respeito das regras de segurança e controlo das variáveis.
4. Explicar os resultados.
5. Desenvolver competências de comunicação na apresentação do projeto de grupo.
6. Seguir todas as etapas do método científico.
7. Tirar conclusões.

Procedimento proposto (disponível detalhadamente em: www.profiles.org.pt)

(duração: 4 aulas)

1. Apresentação do cenário/*brainstorming*/início da planificação da experiência a realizar (continuação fora da aula).
2. Planificar a experiência de acordo com as variáveis e com as grandezas a medir e determinar.
3. Realizar a experiência e alterá-la de acordo com os factos relevantes e/ou a qualidade dos resultados recolhidos.
4. Apresentar o trabalho realizado de forma clara, explicando as opções e resultados subjacentes ao mesmo, assim como os registos laboratoriais e os recolhidos nas outras fontes.
5. A- Elaborar um relatório com a resposta às questões levantadas. B- Elaborar um *poster* da atividade. C- Apresentar o projeto desenvolvido numa "Mostra de Ciência" (**C é opcional**).

Guia do professor

1. Será importante ter em atenção o nível de conhecimentos e capacidade de trabalho dos alunos, para gerir o desenvolvimento dos trabalhos de forma mais ou menos dirigida.
2. Na primeira aula sugerimos trabalho de grupo com posterior discussão com toda a turma. A parte final da aula deverá ser reservada para que o grupo divida tarefas de recolha de informações em diversas fontes e comece a planificar a sua experiência laboratorial.
3. Será importante verificar qual o conjunto de combustíveis escolhidos por cada grupo, guiando-os de forma a alterar algumas hipóteses quando se percebe que elas condicionarão negativamente o trabalho. Para incluir de forma implícita a AL 2.5, será importante que um dos grupos seja levado a comparar álcoois disponíveis. Deverão ser estudados também combustíveis sólidos e gasosos.
4. Antes de dar o aval para a experiência, verificar cuidadosamente a segurança da montagem projetada por cada grupo. Sugere-se que os alunos consigam obter uma montagem semelhante à da Figura 1, mas à qual devem ser acrescentados outros elementos adicionais, tais como isolamentos ou instrumentos de medida.
5. Confirmar se os alunos já ponderaram bem qual a variável principal a controlar (tempo de queima-constante, variação de temperatura da água-constante ou quantidade de combustível-constante) e também as restantes variáveis (quantidade de água; tamanho do pavio; distância da chama ao recipiente; massa do combustível; massa volúmica do combustível e isolamento do recipiente). Por vezes será importante deixar os alunos verificar que a sua planificação era deficiente para que a alterem voluntariamente.
6. Sugere-se veementemente que os alunos façam uma análise da poluição ambiental causada por cada combustível com base na estequiometria das reações, uso de sensores ou recurso a outros reagentes (água de cal).
7. Na apresentação dos resultados à turma será interessante definir: o tempo disponível para a apresentação dos mesmos, o tempo de formulação de questões pelos alunos dos outros grupos, assim como salientar que as respostas finais à questão inicial possam ser diferentes de grupo para grupo, mas ainda assim todas elas válidas.

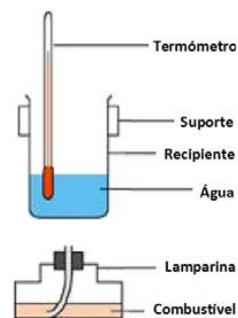


Figura 1 - Montagem de base

Avaliação

Poderá implementar-se uma avaliação sob diferentes perspetivas:

1. Baseada nas competências que se pretendem desenvolver, de valor social, valor científico ou grau de habilidade pessoal.
2. Baseada nas estratégias de cada aula.
3. Baseada na apresentação, síntese e escrita de um relatório e/ou mostra do processo e resultados à comunidade.
4. Baseada em questões presentes em fichas de avaliação sumativa.

Química para os mais novos

Marta C. Corvo

Departamento de Química
Faculdade de Ciências e Tecnologia
Universidade Nova de Lisboa
marta.corvo@fct.unl.pt



Introdução

Os polímeros voltam a aparecer nas atividades para os mais novos. Fazendo justiça à quantidade de polímeros que nos rodeia, iremos novamente debruçar-nos sobre este tema. Seja no papel que escrevemos, na roupa que vestimos ou nos utensílios que usamos, os polímeros naturais ou sintéticos estão realmente por todo o lado. Desta vez será o polímero superabsorvente que se encontra nas fraldas dos bebés o objeto do nosso estudo.

1- Polímeros superabsorventes e as transformações reversíveis

Atenção: O polímero superabsorvente poderá ser irritante para as mucosas nasais e olhos, a sua extração deverá ser feita por um adulto, utilizando proteção ocular e numa zona ventilada.

Material:

- Fraldas descartáveis
- Saco de plástico (45 x 30 cm)
- Fita adesiva
- Tesoura
- 2 Colheres de chá
- 5 Copos de plástico
- Copo medidor de líquidos
- 2 Sacos de chá (pirâmide)
- Cordel (2x20 cm)
- Cloreto de sódio (sal de cozinha)
- Cloreto de cálcio*
- Água destilada ou desionizada
- Papel absorvente
- Marcador



*Poderá ser encontrado em desumidificadores (granulados) à venda em supermercados.

Procedimento:

1. Preparação do **Polímero superabsorvente**

- Cortar o revestimento absorvente da fralda pela parte de dentro e introduzir num saco de plástico. Sem retirar do saco de plástico, separar as fibras de algodão, papel e plástico do interior da camada absorvente.
- Selar o saco de plástico com fita adesiva. Agitar o saco de plástico de modo a que os grânulos de polímero se soltem do enchimento. Juntar o polímero num canto do saco.
- Cortar este canto com o auxílio de uma tesoura e recolher o polímero num copo transparente. Identificar o copo com um marcador (**Polímero superabsorvente**).



- Preparação dos **sacos** de chá: abrir o saco de chá, retirar o conteúdo, lavar o saco com água destilada/desionizada e secar bem antes de iniciar a atividade.
- Colocar $\frac{1}{4}$ de colher de polímero em cada saco de chá. Fechar a abertura com o cordel deixando cerca de 15 cm de cordel para fora.
- Colocar cada saco num copo com 100 mL de água, de modo a que o saco fique completamente mergulhado na água. Esperar até que ambos fiquem completamente inchados.
- Retirar os sacos e secar o excesso de água com papel absorvente. Será que conseguimos que o polímero volte à sua forma inicial rapidamente?



Polímero seco



Polímero depois de absorver água

6. Colocar cada saco num copo vazio. Identificar um dos copos com a letra **A** e o outro com a letra **B**.
7. No copo **A** adicionar duas colheres de cloreto de sódio e no copo **B** adicionar duas colheres de cloreto de cálcio. Observar o que acontece em cada um dos sacos.
8. Virar os sacos algumas vezes para permitir o contacto com o sal. Ajudar com a colher, comprimindo o saco.
9. Retirar os sacos de dentro dos copos e secar com papel absorvente. Utilizar papéis absorventes separados para evitar contaminação.
10. Identificar novamente dois copos, respetivamente com as letras **A** e **B**.
11. Lavar cada saco com 100 mL de água no respetivo copo. Agitar o copo durante 10 segundos e descartar a água. Repetir a lavagem em cada copo 4x.

**[Polímero +
cloreto de sódio]**



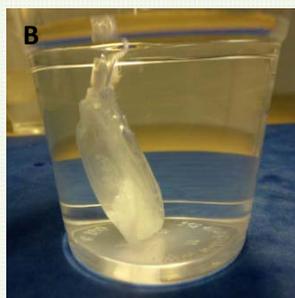
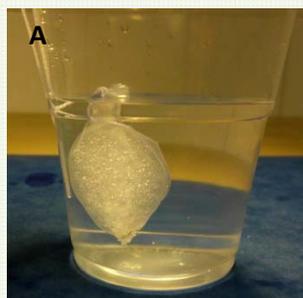
**[Polímero +
cloreto de sódio]
depois de lavado**

**[Polímero +
cloreto de cálcio]**



**[Polímero +
cloreto de cálcio]
depois de lavado**

12. Secar cada saco em papéis absorventes separados. Será que agora os polímeros voltam a inchar?
13. Voltar a colocar cada um dos sacos em copos com água durante 10 minutos.
14. Retirar os sacos de dentro dos copos e secar com papéis absorventes separados. Observar ambos os sacos comparando os respetivos volumes.



Explicação:

Um polímero é uma substância constituída por unidades mais pequenas, os monómeros, que se repetem e estão ligadas entre si formando cadeias longas (ver QUÍMICA 125, páginas 87-88). Nesta atividade utilizámos um polímero de poliacrilato superabsorvente presente nas fraldas descartáveis. Estes polímeros são hidrofílicos, o que significa que gostam de água, e como são superabsorventes têm a capacidade para absorver grandes quantidades deste líquido. Como são constituídos por muitas cadeias ligadas entre si formando uma rede, estes polímeros não se dissolvem em água. Quando colocamos o polímero em contacto com água, as moléculas de água entram dentro da rede de cadeias do polímero ocupando espaços no meio das cadeias. As cadeias do polímero ficam mais afastadas e ele aumenta de volume - fica inchado, transforma-se num gel transparente e macio. Esta capacidade, embora muito grande, não é, claro, ilimitada, e quando o polímero não consegue inchar mais, já não consegue absorver mais água.

Para tentar que o polímero voltasse rapidamente à sua forma inicial adicionámos dois sais distintos - cloreto de sódio e cloreto de cálcio. Quando adicionámos cloreto de sódio ao gel (**A**), as moléculas de água que estavam dentro do polímero vieram cá para fora. O cloreto de sódio que entretanto entra no meio do polímero vai interferir com a sua capacidade de absorção de água e o gel começa a encolher. Quando adicionámos cloreto de cálcio ao gel (**B**) obtivemos um efeito semelhante, mas mais rápido. As moléculas de água que se encontravam dentro do polímero vêm para fora, o cloreto de cálcio entra também no meio do polímero, e o gel encolhe muito depressa. A absorção inicial de água foi nos dois casos uma transformação reversível.

Quando voltámos a colocar o que resultou dos géis **A** e **B** dentro de água, as amostras tiveram comportamentos diferentes. O polímero que tinha estado em contacto com cloreto de sódio (**A**) voltou a aumentar de volume – continuou assim a sofrer transformações reversíveis. O polímero que esteve em contacto com o cloreto de cálcio (**B**) não conseguiu voltar a aumentar - a sua transformação foi irreversível, ou seja já não consegue voltar a inchar. Ao contrário do sódio presente no sal de cozinha, o cálcio no copo **B** ao entrar para o polímero vai fazer com que as suas cadeias fiquem ainda mais ligadas entre si. Deste modo quando entra de novo em contato com água, as cadeias já não se conseguem afastar, e por isso o polímero não permite a entrada de moléculas de água - não forma um gel. Com o sódio as cadeias de polímero não formam ligações adicionais, como tal, quando entra em contato com água o polímero volta a formar um gel. Este polímero não é só superabsorvente, como tem a capacidade de reverter esta absorção consoante as características do meio que o rodeia, diz-se um polímero inteligente.

Outros exemplos de polímeros superabsorventes encontram-se na gelatina e nas lentes de contato.

Bibliografia

[1] Adaptado de JCE Classroom Activity - JCE Classroom activity Connections: NaCl or CaCl₂, Smart Polymer Gel Tells More, Chen, Y.-H.; Lin, J.-Y.; Wang, Y.-C. *J. Chem. Ed.* **2010**, *87*, 1329.

XXIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química
12 – 14 junho 2013 em Aveiro

O XXIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química terá lugar nos dias 12 a 14 de junho de 2013, no complexo pedagógico (edifício 23) da Universidade de Aveiro, estando a sua organização a cargo do Departamento de Química desta universidade.

Numa época de enormes desafios para a Sociedade, em particular para a Química, o tema aglutinador deste evento será, precisamente, **Desafios em Química**. Assim, teremos sessões centradas em alguns dos reptos que se colocam hoje aos Químicos e Engenheiros Químicos, nomeadamente: síntese e fabrico de substâncias; proteção do indivíduo e Química Analítica; Química Computacional e teoria e desenho molecular; bioquímica; biotecnologia; desenho de fármacos; ciência de materiais, biomateriais e nanotecnologia; Química Ambiental; Engenharia Química; relações públicas e educação. Este Encontro contará, quer com a contribuição de reconhecidos oradores nacionais e estrangeiros, quer com participação de jovens investigadores, que terão responsabilidade de enfrentar os futuros desafios em Química.

E: artur.silva@ua.pt



9.º Encontro Nacional de Catálise e Materiais Porosos
6 – 7 maio 2013 no Porto

Em 2007 teve lugar o último Encontro Nacional de Catálise e Materiais Porosos. Desde então, a Divisão de Catálise e Materiais Porosos esteve envolvida na organização do EUROPACAT IX – Catalysis for a Sustainable World, em 2009, manteve as representações na EFCATS e na FISOCAT, e associou-se à homenagem prestada pelo IST ao saudoso Prof. Ramôa Ribeiro, figura incontornável desta Divisão, no Simpósio Catalysis: From the Active Site to the Process, em 2012. A catálise e os processos de adsorção constituem disciplinas de enorme abrangência e com um enorme conjunto de eventos regulares por todo o mundo, inclusive em Portugal, o que de certo modo restringe a disponibilidade para o evento nacional.

No ano de 2011 celebrou-se o centenário da SPQ e o Ano Internacional da Química e todos os nossos associados estiveram envolvidos em inúmeras atividades. E, finalmente, no campo da fotocatalise, teve lugar em Portugal, em 2012, um dos mais importantes encontros internacionais da comunidade, o 7th European Meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications - SPEA7.

É chegada a altura de reunir a comunidade nacional e retomar a regularidade dos nossos Encontros. Por isso, a Comissão Organizadora tem o prazer de convidar todos os interessados a participarem no 9.º Encontro Nacional de Catálise e Materiais Porosos, a realizar nos dias 6 e 7 de maio de 2013, no Porto.

Será uma reunião de dois dias, que se espera muito intensa e onde contamos com a inspiração dos nossos palestrantes convidados para captar a atenção dos mais jovens e conseguir um ambiente ativo com trocas de ideias animadas e incentivadoras.

O portal foi lançado no dia 8 de fevereiro, onde podem encontrar mais informações.

Contamos com a vossa atividade para catalisar este processo!

E: eventos@spq.pt

URL: <http://9encmp.eventos.chemistry.pt>



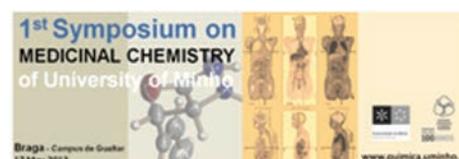
11.º Encontro Nacional de Química Física
9 – 10 maio 2013 no Porto

Sob os auspícios da Divisão de Química-Física da Sociedade Portuguesa de Química, decorrerá, na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, nos dias 9 e 10 de maio de 2013, o 11.º Encontro Nacional de Química-Física.

Esta série de eventos, cujo início teve lugar em Lisboa (1993), tem como objetivo fomentar a divulgação e discussão dos avanços mais recentes na área da Química-Física, primando pela qualidade dos trabalhos apresentados.

Mais informações serão disponibilizadas brevemente através da página Web do encontro, em preparação.

E: mdsilva@fc.up.pt



1st Symposium on Medicinal Chemistry of University of Minho
17 maio 2013 em Braga

O 1st Symposium on Medicinal Chemistry of University of Minho é um encontro científico onde se pretende a divulgação e a discussão de trabalhos de investigação nos contextos académico e industrial no domínio da Química Medicinal.

Este simpósio é especialmente dedicado a estudantes e jovens investigadores e inclui no seu programa duas sessões plenárias, três comunicações orais convidadas e comunicações orais e em painel.

O simpósio decorrerá no dia de 17 de maio de 2013 no auditório B1 da Universidade do Minho, em Braga.

E: mquimicamedicinal@quimica.uminho.pt

URL: <http://www.quimica.uminho.pt>

11th International Conference on Catalysis in Membrane Reactors (ICCMR11)
7 – 11 julho 2013 no Porto



A série de conferências ICCMR teve início em 1994, na cidade de Lyon, em França, tendo prosseguido com carácter bienal em diferentes localizações do globo. Em 2013, caberá à cidade do Porto acolher a realização do ICCMR11, a qual decorrerá entre os dias 7 e 11 de junho, com o apoio da Sociedade Portuguesa de Química.

A reunião ICCMR11 visa abranger todos os aspetos relacionados com reatores de membrana, reunindo investigadores que trabalhem na área de membranas, catálise e engenharia de processos, e procurando proporcionar a todos os participantes oportunidades de discussão e troca de ideias. Todos estes temas são individualmente cobertos por várias conferências específicas, contudo, na série ICCMR, pretende-se que tal ocorra de forma simultânea e interdisciplinar. Assim, a conferência incluirá os seguintes tópicos a abordar: Reatores de membrana e catálise química; Reatores de membrana condutora de iões; Reatores de membrana fotocatalíticos e fotoeletroquímicos; Reatores de membrana e biocatálise; Novos *designs* e conceitos.

O programa científico incluirá 4 sessões plenárias, diferentes apresentações keynote, comunicações orais e sessões de pósteres. Serão atribuídos prémios às melhores contribuições de estudantes com idade inferior a 30 anos. Como vem sendo usual nesta série de conferências, serão selecionados trabalhos para publicação num número especial da revista internacional "Catalysis Today". Mais informações sobre submissão de trabalhos, entre outras, devem ser obtidas na página Web da conferência.

E: iccmr11@fe.up.pt

URL: <http://iccmr11.eventos.chemistry.pt>



10.º Encontro Nacional de Química Orgânica
4 – 6 setembro 2013 em Lisboa

Terá lugar na Faculdade de Farmácia de Lisboa, entre os dias 4 e 6 de setembro, o 10.º Encontro Nacional de Química Orgânica. Este encontro decorre sob os auspícios da Divisão de Química Orgânica da Sociedade Portuguesa de Química, juntamente com o 1.º Simpósio Luso-Brasileiro de Química Orgânica.

Trata-se de um evento único que irá permitir reunir investigadores portugueses e brasileiros da área da química orgânica num programa científico de alta qualidade que percorre e se estende ao longo dos muitos aspetos da química orgânica moderna, embora com foco particular na interface da química orgânica com as ciências biológicas.

O evento irá integrar um total de 10 lições plenárias, 6 das quais proferidas por eminentes oradores internacionais,

mais de 20 comunicações orais, 10 apresentações *flash* e uma sessão de posters.

Durante o encontro, serão premiados três jovens cientistas pela Divisão de Química Orgânica com os prémios *Portuguese Young Organic Chemist Award*, *Portuguese Award for Best PhD Thesis* and *Portuguese Award for Best Master Thesis*. Serão igualmente atribuídos prémios para as melhores apresentações proferidas no âmbito de técnicas cromatográficas, de massa e de RMN.

Detalhes sobre estas e outras informações podem ser obtidas no portal do encontro.

URL: <http://10enqo.eventos.chemistry.pt>

18th International Conference on Flow Injection Analysis
15 – 20 setembro 2013 no Porto



A 18.ª edição da International Conference on Flow Injection Analysis, irá decorrer no Porto, entre os dias 15 e 20 de setembro de 2013, sendo realizada com o apoio da Sociedade Portuguesa de Química.

Esta conferência pretende proporcionar aos participantes um fórum de discussão de novas ideias e avanços instrumentais no campo da injeção de fluxo, bem como de temas e técnicas relacionadas. A conferência tem também como objetivo contribuir para o reforçar de laços de amizade entre os investigadores da área e estimular parcerias em trabalhos futuros.

Informações sobre o programa científico, entre outras, serão brevemente disponibilizadas na página web da conferência.

E: icfia18@gmail.com

URL: <http://icfia.eventos.chemistry.pt>



8.º Encontro Nacional de Cromatografia
2 – 4 dezembro 2013 na Covilhã

O 8.º Encontro Nacional de Cromatografia, organizado pelo Grupo de Cromatografia da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e o Centro de Investigação em Ciências da Saúde da Universidade da Beira Interior (UBI), realizar-se-á na Covilhã, entre 2 e 4 de dezembro, na Faculdade de Ciências da Saúde da UBI.

Os principais objetivos deste evento são os de realçar os avanços científicos que envolvam fundamentos, desenvolvimentos e aplicações de técnicas cromatográficas nos mais diversos domínios, bem como fomentar a cooperação científica entre os participantes. O Programa Científico do 8.º Encontro Nacional de Cromatografia estará disponível brevemente, sendo composto por diversas comunicações com base nos avanços e inovações da área de cromatografia analítica e preparativa, abordando os seguintes

tópicos principais: Fundamentos (Modelos teóricos, Avaliação experimental), Desenvolvimento (Preparação de amostras, Cromatografia líquida e gasosa, Cromatografia multidimensional, Técnicas hífenadas, Desenvolvimento e validação de métodos, etc.) e Aplicações (Alimentares, Ambientais, Aromas e Fragrâncias, Biomédicas e Farmacêuticas, Sistemas Biológicos, etc.).

Toda a informação sobre este evento pode ser obtida através do acesso ao respetivo website.

URL: <http://8enc.eventos.chemistry.pt>



14th EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment (ICCE 2013)
25 – 28 junho 2013 em Barcelona, Espanha

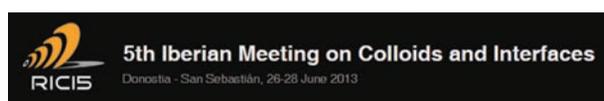
Terá lugar no dia 25 de junho o início da 14.^a edição da série de conferências com carácter bienal EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment. Este evento, que decorrerá em Barcelona, é organizado pela Divisão de Química e Ambiente (DCE) da Associação Europeia para as Ciências Químicas e Moleculares (EuCheMS).

À semelhança do encontro anterior que decorreu em 2011 em Zurique, no qual estiveram presentes cerca de 500 delegados provenientes de 52 países, espera-se que este seja um evento muito participado. Os principais objetivos desta conferência consistem em relacionar a investigação com as questões ambientais existentes na atualidade, bem como com questões futuras, promover a discussão sobre aspetos relacionados com o destino de produtos químicos no ambiente e promover uma chamada de atenção para contaminantes emergentes. O programa científico estará organizado segundo os seguintes tópicos principais: Química atmosférica e aerossóis; Detritos, poluição de solos e sedimentos; Poluição e tratamento de águas; (Eco-)Toxicologia: exposição a poluentes e efeitos nos ecossistemas; Modelação, gestão e avaliação de riscos; Transformação e destino de poluentes; Indústria química verde e sustentável; Poluentes emergentes.

Aconselha-se a consulta do Website do encontro para mais informações.

E: sci@icce2013.org ou secretariat@icce2013.org

URL: <http://www.icce2013.org/wellcome.html>



5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI5)
26 – 28 junho em Donostia-San Sebastián, Espanha

A 5.^a Reunião Ibérica de Colóides e Interfaces (RICI5), promovida conjuntamente pelo Grupo Especializado de Co-

loides e Interfaces (GECI) das Reais Sociedades Espanholas de Química e de Física (RSEQ e RSEF) e o Grupo de Colóides, Polímeros e Interfaces (GCPI) da SPQ, irá decorrer na bela cidade de Donostia-San Sebastián, no País Basco, Espanha, de 26 a 28 de junho de 2013. Esta reunião vem no seguimento do grande sucesso científico e organizativo alcançado nos congressos anteriores, realizados no Porto (RICI4, 2011), em Granada (RICI3, 2009), em Coimbra (RICI2, 2007) e em Salamanca (RICI1, 2005).

O evento tem um carácter fortemente transdisciplinar, visando reunir a comunidade ibérica da área de colóides e sistemas auto-organizados, interfaces e superfícies, materiais poliméricos e nano-estruturados, e todas as áreas temáticas afins, independentemente da formação de base e abordagem científica dos investigadores. Pretende-se incentivar fortemente a participação de jovens investigadores ibéricos, para intercâmbio de ideias e perspectivas na área de interfaces e colóides (caracterização, modelação, simulação e aplicações), em conjunto com cientistas mais seniores de Portugal, Espanha e de outros países participantes.

O programa do encontro inclui 3 comunicações plenárias de 45 minutos (*Plenary Lectures*), e 10 comunicações convidadas de 30 minutos (*Invited Lectures*), proferidas por jovens investigadores ibéricos, bem como um elevado número de comunicações orais e em poster. Dada a crescente internacionalização do evento, a língua adotada maioritariamente nas comunicações é o inglês, embora, naturalmente, o português e o castelhano sejam bem-vindos. O programa engloba as seguintes sessões temáticas: 1) Nanoparticles: organic, inorganic and hybrids; 2) Polymers, polyelectrolytes, surfactants and gels; 3) Soft colloids, soft nanotechnology and bioinspired systems; 4) Colloids and energy; 5) Surfaces and interfaces; 6) Modeling and simulations; 7) Biotechnological applications. A taxa de inscrição inclui duas refeições, dois almoços e o jantar do congresso. As comissões organizadora e científica convidam-vos a visitar a página web do evento e conta com a vossa participação!

Poderão ser encontradas informações mais detalhadas no website do congresso, ou solicitadas à comissão de organização local.

E: rici5@ehu.es

URL: <http://rici5.eu>

33rd International Conference on Solution Chemistry (33ICSC)
7 – 12 julho 2013 em Quioto, Japão



Irá realizar-se em Quioto, Japão, a 33.^a edição da Conferência Internacional em Química de Soluções (33ICSC). Este evento, organizado pela Associação Japonesa de Química de Soluções (JASC), Sociedade Japonesa de Química Analítica (JSAC) e pela IUPAC, dá seguimento às edições anteriores realizadas em La Grande Motte (2011), Innsbruck (2009) e Perth (2007).

Esta conferência almeja reunir investigadores provenientes de todas as partes do globo para a discussão do es-

tado da arte e de temas relacionados com a química de soluções, incluindo química analítica, líquidos iónicos, condições extremas, altas pressões, colóides e interfaces, eletroquímica, entre outros.

A segunda circular do evento encontra-se já disponível no website do mesmo.

E: info@ift.org

URL: www.solInchem.jp/33ICSC

International Turkish Congress on Molecular Spectroscopy (TURCMOS 2013)

15 – 20 setembro 2013 em Istambul, Turquia



Irá decorrer em Istambul, entre os dias 15 e 20 de setembro de 2013, o Congresso Internacional Turco em Espectroscopia Molecular (TURCMOS 2013). Este congresso,

que decorrerá com o apoio da SPQ, pretende apresentar os desenvolvimentos mais recentes nesta área de investigação, bem como incentivar a troca de ideias e estimular colaborações futuras entre investigadores de todo o mundo. Todos os aspetos relacionados com métodos espectroscópicos, assim como com as abordagens computacionais e teóricas relacionadas, serão alvo de interesse neste congresso. Os tópicos deste evento incluem diversos tipos de espectroscopia, entre as quais Vibracional (IR e Raman), Mössbauer, Fluorescência, Micro-ondas, entre outras; Aplicações em diferentes áreas (arqueologia, geologia, análise de alimentos, aplicações em biologia, entre outras); Métodos analíticos e nova instrumentação; Novos materiais; etc.

O congresso incluirá vários conferencistas de renome, de entre os quais se salientam os convidados de honra Sir Harold Walter Krotoschiner (Prémio Nobel de Química, 1996) e Walter Kohn (Prémio Nobel de Química, 1998) e o orador convidado Prof. Dr. Rui Fausto da Universidade de Coimbra.

É igualmente de salientar o facto de existir um desconto de 10% para os sócios da Sociedade Portuguesa de Química. Podem ser obtidas mais informações através do website do congresso.

E: unsalan@istanbul.edu.tr

URL: <http://www.turcmos2013.org>



Fundamental
and
Applied Rheology

Iberian Meeting on Rheology (IBEREO) 5 – 6 setembro 2013 em Málaga, Espanha

O Iberian Meeting on Rheology irá decorrer em Málaga, Espanha, nos dias 5 e 6 de setembro de 2013. Este encontro ocorre a cada dois anos, pretendendo reunir sobretudo investigadores portugueses e espanhóis para apresentar os avanços e desenvolvimentos mais recentes nesta área. A presente edição terá lugar na Escola de Engenharia da Uni-

versidade de Málaga e incluirá oito simpósios, cobrindo os mais diversos aspetos da reologia, nomeadamente: Biomateriais e Biopolímeros; Alimentos, Cosméticos e Produtos Farmacêuticos; Formulação e Engenharia de Produto; Sistemas Multifásicos e Compósitos; Mecânica de Fluidos Não-newtonianos; Polímeros e Cristais Líquidos; Métodos Experimentais e Reometria; Suspensões e Colóides.

Para mais informações consultar o portal do encontro.

E: ibereo2013org@uma.es

URL: <http://www.fluidmal.uma.es/IBEREO2013/>



VII EPOA – Encontro sobre Aplicações Ambientais de Processos Oxidativos Avançados / I CIPOA – Congresso Ibero-americano de Processos Oxidativos Avançados 15 – 18 Outubro 2013 em Recife, Brasil

O Encontro sobre Aplicações Ambientais de Processos Oxidativos Avançados (EPOA), idealizado pelo grupo de investigação do Prof. Dr. Wilson F. Jardim (Laboratório de Química Ambiental do Instituto de Química da UNICAMP), tem sido realizado a cada dois anos desde 2001.

Estes encontros foram importantes fóruns para a apresentação e discussão de diferentes processos, que têm em comum o uso de espécies radicalares (principalmente o radical hidroxilo) como agentes oxidantes de compostos orgânicos tóxicos e ou recalcitrantes.

Desde sua primeira edição, o EPOA tem atraído um número crescente de profissionais ligados ao desenvolvimento e aplicação de processos oxidativos avançados para tratamento de efluentes industriais aquosos, redução de toxicidade de efluentes e remoção de poluentes de sistemas contaminados.

O evento tem reunido profissionais dos mais diversos setores, tais como universidades nacionais e internacionais, setor produtivo privado, empresas prestadoras de serviços, fornecedores de equipamentos, agências de controlo ambiental, etc. Por todos estes motivos, o EPOA afirmou-se como o principal fórum de debates no Brasil, e um dos mais importantes da América Latina, sobre o desenvolvimento destes processos inovadores aplicados ao tratamento de efluentes ou solos contaminados por substâncias orgânicas de alta toxicidade e de difícil oxidação.

No ano de 2013 o evento chegará à sua sétima edição, sendo realizado em conjunto com o I Congresso Ibero-americano de Processos Oxidativos Avançados (CIPOA), passando a abranger mais linhas de investigação e a ser um evento de carácter internacional. Nessa edição, o evento será realizado pela primeira vez no Nordeste do Brasil, no estado de Pernambuco.

E: otidene.rocha@ufpe.br

URL: <http://www.ufpe.br/7epoa1cipoa>

Secção compilada por **Joana Amaral**
(bquimica@ipb.pt) www.spq.pt

6 – 7 maio 2013 no Porto

9.º Encontro Nacional de Catálise e Materiais Porosos
E: eventos@spq.pt
URL: <http://9encmp.eventos.chemistry.pt>

7 – 10 maio 2013 em Istambul, Turquia

EuroFoodChem XVII
E: arber@arber.com.tr
URL: <http://www.arber.com.tr/eurofoodchemxvii.org/index.php/home>

9 – 10 maio 2013 no Porto

11.º Encontro Nacional de Química Física
E: mdsilva@fc.up.pt

13 – 15 maio 2013 em Sitges, Espanha

3rd International Conference on Bio-Sensing Technology
E: r.chi@elsevier.com
URL: <http://www.biosensingconference.com/index.html>

17 maio 2013 em Braga

1st Symposium on Medicinal Chemistry of University of Minho
E: mquimicamedicinal@quimica.uminho.pt
URL: <http://www.quimica.uminho.pt>

30 maio – 2 junho 2013 em Zlatibor Mountain, Sérvia

5th Serbian-Croatian-Slovenian Symposium on Zeolites
E: ljiljana@ffh.bg.ac.rs
URL: <http://www.zds.org.rs/con-home.htm>

10 – 12 junho 2013 em Barcelona, Espanha

5th European Conference Chemistry for Life Sciences
E: eccls2013@vibocongresos.com
URL: <http://www.5ecclsbarcelona.com>

12 – 14 junho 2013 em Aveiro

XXIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química
E: artur.silva@ua.pt

16 – 21 junho 2013 em Pisa, Itália

Congress of the European Polymer Federation (EPF-2013)
E: gallig@dcc.unipi.it
URL: <http://www.epf2013.org>

18 – 21 junho 2013 em Novara, Itália

7th International Congress on Pigments in Food
E: pif2013@pif2013.org
URL: <http://pif2013.org>

25 – 28 junho 2013 em Barcelona, Espanha

14th EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment
E: sci@icce2013.org
URL: <http://www.icce2013.org/wellcome.html>

26 – 28 junho 2013 em San Sebastian, Espanha

5.ª Reunião Ibérica de Colóides e Interfaces (RICI5)
E: rici5@ehu.es
URL: <http://rici5.eu>

30 junho – 4 julho 2013 em St. Andrews, Escócia

20th EuCheMS Conference on Organometallic Chemistry
E: eucomc@st-andrews.ac.uk
URL: <http://www.eucomcxx.com>

3 – 5 julho 2013 em Limerick, Irlanda

5th Eurovariety in Chemistry Education Conference
E: peter.childs@ul.ie
URL: <http://www.eurovariety2013.ul.ie>

7 – 12 julho 2013 em Quioto, Japão

33rd International Conference on Solution Chemistry (ICSC 2013)
E: yamaguchi@fukuoka-u.ac.jp
URL: <http://www.solnchem.jp/33ICSC>

7 – 12 julho 2013 em Marselha, França

18th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 2013)
E: esoc2013@atout-org.com
URL: <http://www.esoc2013.eu/index.html>

7 – 11 julho 2013 no Porto

11th International Conference on Catalysis in Membrane Reactors
E: iccmr11@fe.up.pt
URL: <http://iccmr11.eventos.chemistry.pt>

8 – 11 julho 2013 em Praga, República Checa

19th European Symposium on Polymer Spectroscopy (ESOPS 19)
E: spevacek@imc.cas.cz
URL: <http://www.imc.cas.cz/en/umch/konference.htm>

28 julho – 1 agosto 2013 em Fort Collins, Colorado, EUA

17th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS17)
E: peter.kundig@unige.ch
URL: <http://www.omcos17.com>

11 – 16 agosto 2013 em Istambul, Turquia

4th IUPAC Congress - Clean Energy Through Chemistry
E: mehmah@istanbul.edu.tr
URL: <http://iupac2013istanbul.org>

4 – 6 setembro 2013 em Lisboa

10.º Encontro Nacional de Química Orgânica
URL: <http://10enqo.eventos.chemistry.pt>

5 – 6 setembro 2013 em Málaga, Espanha

Iberian Meeting on Rheology
E: ibereo2013org@uma.es
URL: <http://www.fluidmal.uma.es/IBEREO2013>

15 – 20 setembro 2013 no Porto

18th International Conference on Flow Injection Analysis
E: icfia18@gmail.com
URL: <http://icfia.eventos.chemistry.pt>

15 – 20 setembro 2013 em Istambul, Turquia

International Turkish Congress on Molecular Spectroscopy
E: unsalan@istanbul.edu.tr
URL: <http://www.turcmos2013.org>

14 – 18 outubro 2013 no Funchal

Symposium on temperature and Thermal Measurements in Industry and Science
E: enc2013@fcsaude.ubi.pt
URL: <http://www.tempmeko2013.pt/home.php>

15 – 18 outubro 2013 em Recife, Brasil

VII EPOA - Encontro sobre Aplicações Ambientais de Processos Oxidativos Avançados / I CIPOA - Congresso Ibero-americano de Processos Oxidativos Avançados
E: otidene.rocha@ufpe.br
URL: <http://www.ufpe.br/7epoa1cipoa>

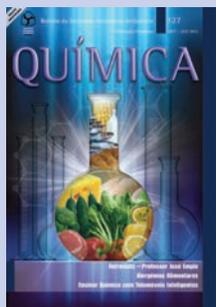
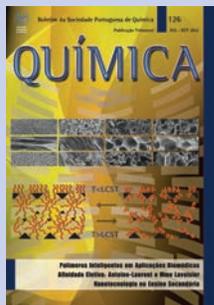
28 – 30 outubro 2013 em Almería, Espanha

3rd European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes
E: eaaop3.contact@psa.es
URL: <http://www.eaaop3.com>

2 – 4 dezembro 2013 na Covilhã

8.º Encontro Nacional de Cromatografia
E: enc2013@fcsaude.ubi.pt
URL: <http://8enc.eventos.chemistry.pt/?ver=inicio>

Secção compilada por **Joana Amaral**
(bquimica@ipb.pt) www.spq.pt



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

QUÍMICA publica entrevistas, reportagens, artigos solicitados e propostos, noticiário, resenhas de livros e outras publicações e correspondência dos leitores. É incentivada a submissão voluntária de artigos de caráter relativamente geral e escritos de modo a despertar interesse a um vasto leque de leitores.

QUÍMICA, não sendo especializado na história e filosofia da química, está aberto e pretende encorajar a publicação de contribuições nesta área. O QUÍMICA pode também incluir artigos de autores especialmente convidados para publicarem sobre temas específicos da história e da filosofia da química.

NORMAS DE COLABORAÇÃO E INSTRUÇÕES PARA OS AUTORES

- Os artigos devem ser enviados por correio eletrónico, para o endereço bquimica@quimica.uminho.pt, dirigidos ao Editor do QUÍMICA. O material submetido deverá conter o seguinte:
 - Um arquivo MS Word com as figuras e tabelas incorporadas. O texto deve ser escrito com espaçamento duplo. Tabelas, gráficos e ilustrações devem ser numerados e incorporados com as respetivas legendas descrevendo sumariamente o seu conteúdo. As citações longas devem ficar destacadas no texto; as curtas devem ser colocadas entre aspas.
 - Um arquivo adicional devidamente identificado, por cada gráfico ou ilustração, em formato JPG ou TIFF, com a resolução adequada a uma boa reprodução gráfica no tamanho original.
- Os artigos devem conter um resumo de 50 a 200 palavras com a descrição do respetivo conteúdo. Salvo casos excecionais, os textos não devem exceder cerca de 30 000 caracteres (5 a 6 páginas da revista, incluindo as figuras). As figuras deverão ter a qualidade indispensável.
- Os artigos devem seguir, tanto quanto possível, as recomendações da IUPAC quanto à nomenclatura e unidades.
- As referências devem ser numeradas consecutivamente à medida que forem citadas ao longo do texto e indicadas por um número colocado entre parênteses retos (exemplos: [1] ou [2, 3] ou [4-8]). As referências devem ser reunidas no fim do texto, obedecendo aos seguintes formatos:

LIVROS:

- [1] S.J. Formosinho, Fundamentos de Cinética Química, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1982.
- [2] R.S. Turner, 'University Reformers and Professional Scholarship in Germany, 1760-1806', in L. Stone (ed.), The University in Society, Princeton: Princeton University Press (1974) 495-531.
- [3] R.S. Turner, op. cit. 'University', 496-497.

PUBLICAÇÕES PERIÓDICAS:

- [4] G. Krager, Nachrichten aus der Chemie 53 (2005) 136-138.
- [5] A.N.L. Lopes, J.G. Ferreira, Analytical Biochemistry 342 (2005) 195-197.

FONTES MANUSCRITAS:

As fontes manuscritas devem conter todas as informações necessárias que permitam a localização da fonte; referências posteriores devem citar nome, data e abreviatura da fonte, caixa, número da página ou fólio:

- [6] Carta de Adolphe Wurtz a Jean-Baptiste Dumas, 15 de fevereiro de 1864, Paris, Archives de l'Académie des Sciences, Dossier Wurtz.

ENDEREÇOS ELETRÓNICOS:

A utilização de endereços eletrónicos deve ser evitada e limitada a fontes institucionais fidedignas; deve conter o endereço completo, de modo a permitir a localização da fonte, e a data de acesso.

- [7] SDBS Web: <http://www.aist.go.jp/RIODDB/SDBS> (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, acessado em 01-01-2006).

- Os agradecimentos devem ser colocados no fim dos artigos, antes das referências.
- O corpo editorial acusará a receção das colaborações propostas e os textos serão apreciados por um ou mais avaliadores. Com base nas apreciações obtidas, será decidida a aceitação, recusa das colaborações propostas, ou eventualmente a revisão dos textos pelos autores antes de tomar uma decisão definitiva.
- Em casos especiais, sujeitos à concordância da Comissão Editorial do QUÍMICA, as contribuições poderão ser publicadas em inglês, ou noutra língua estrangeira, devendo então conter um resumo suplementar em português.
- Os artigos submetidos para publicação no QUÍMICA não podem ser submetidos a outras revistas. A reprodução de figuras já publicadas carece da devida autorização pelo detentor dos direitos. A autorização para reproduzir imagens é inteiramente da responsabilidade do autor, o que deverá ser referido nos casos em que se aplique.
- Os direitos de autor dos artigos publicados são propriedade da Sociedade Portuguesa de Química, não se autorizando a sua reprodução total ou parcial, mesmo sob a forma de tradução numa língua diferente, salvo com autorização escrita da Comissão Editorial.
- No caso dos autores desejarem corrigir as provas dos textos aceites para publicação, deverão indicá-lo expressamente aquando da submissão do manuscrito.
- As provas tipográficas dos artigos em coautoria, bem como as separatas, serão enviadas para o autor responsável, a menos que o Editor seja informado do contrário.
- A inobservância de qualquer das normas de colaboração poderá levar à devolução do texto recebido.

CONTACTOS:

Editor do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química: **JOÃO PAULO ANDRÉ**
Departamento de Química - Universidade do Minho
4710-057 Braga
Tel.: 253 604 385 - E-mail: bquimica@quimica.uminho.pt