



# ÍNDICE

EDITORIAL .....	2
NOTICIÁRIO SPQ .....	3
ENTREVISTA	
Filipe A. Almeida Paz (Medalha Vicente de Seabra 2014) .....	5
LIVROS	
Jardins de Cristais – Química e Literatura – <i>Sérgio Rodrigues</i> .....	11
Recensão crítica de Jorge Calado	
Mestre Carbono, O Cientista – <i>Filipe L.S. Monteiro</i> .....	13
Recensão crítica de Raquel Gonçalves-Maia	
OUTRA QUÍMICA .....	15
<i>Carlos Nieto de Castro</i>	
ANO INTERNACIONAL DA LUZ	
Química Bioinorgânica e Luz – Fotossíntese, Oxigénio e Água .....	17
<i>José J.G. Moura, Luísa B. Maia, Sofia R. Pauleta, Isabel Moura</i>	
ARTIGOS	
Marcos Históricos em Cristalografia .....	21
<i>Maria João Romão, Teresa Santos-Silva, Isabel Bento, Filipe Freire, Marino F.A. Santos, Ana Luísa Carvalho</i>	
Simplicidade na Ciência .....	31
<i>J. Lima-de-Faria</i>	
Ondas, Cristais e Estrutura Biomolecular - Uma perspectiva histórica .....	35
<i>Raquel Gonçalves-Maia</i>	
Vicente Coelho de Seabra - Filósofo agricultor e patriota .....	41
<i>A.M. Amorim da Costa</i>	
Para uma Cultura Integral: o contributo da história da ciência .....	55
<i>António Manuel Nunes dos Santos</i>	
QUÍMICA E ENSINO	
A Química em Código(s) .....	59
<i>Vasco D.B. Bonifácio</i>	
QUÍMICA PARA OS MAIS NOVOS .....	61
<i>Marta C. Corvo</i>	
DESTAQUES .....	65
AGENDA .....	68



O QUÍMICA 136 é dedicado à cristalografia que em 2014 esteve sob as luzes da ribalta por este ter sido decretado pela UNESCO o Ano Internacional da Cristalografia. Para além dos artigos que celebram e divulgam esta área da ciência que é tão próxima da Química, nesta edição há ainda a destacar a tradicional entrevista ao vencedor da Medalha Vicente de Seabra, com que a SPQ em cada biénio premeia o trabalho de jovens químicos portugueses. Muito oportunamente esta entrevista é acompanhada por um artigo sobre a figura do eminente químico - e muito mais do que isso - Vicente Coelho de Seabra, cujos 250 anos do nascimento se assinalaram em 2014.

2015 é o Ano Internacional da Luz e o QUÍMICA publica nesta edição o primeiro de vários textos/artigos com que pretende ao longo dos próximos meses assinalar o acontecimento (a *call* para estas contribuições mantém-se aberta até ao final do ano).

Chamo a atenção para a nova modalidade de acesso *online* de todas as publicações da SPQ na sua página *web*. A partir de agora é possível aceder separadamente a artigos e outras rubricas, podendo a pesquisa ser feita por autores, temas, títulos, etc.

E de resto assim vai o mundo, incerto e indefinido; assustadoramente sobrevoado por algumas nuvens plúmbeas (termo muito pomposo mas que dá algum jeito nas aulas de Química) - esperemos que se dissipem.

Um bom ano,  
João Paulo André

## BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

### 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 136, Janeiro – Março 2015

### Redacção e Administração

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

### Editor

João Paulo André

### Editores-Adjuntos

Ana Paula Esteves, António Mendonça,  
Carlos Baleizão, Paulo Mendes

### Comissão Editorial

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

1 500 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 Direcção do QUÍMICA.

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

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

### Publicação subsidiada pela

**FACT** 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

## A FCT-UNL CELEBRA O ANO INTERNACIONAL DA CRISTALOGRAFIA

Com uma sessão inaugural no dia 2 de Abril de 2014, a FCT-UNL deu início às celebrações locais do Ano Internacional da Cristalografia, proclamado para 2014 pela Assembleia Geral das Nações Unidas, com o objectivo de divulgar o impacto da Cristalografia em diversas áreas do conhecimento.

São vários os acontecimentos históricos que justificam esta celebração internacional, tal como descrito no *website* da UNESCO. Além dos 100 anos do nascimento da Cristalografia com os trabalhos de Max von Laue (Prémio Nobel em 1914, pela sua descoberta da difracção de raios-X por cristais) e de William Henry Bragg e William Lawrence Bragg (pai e filho, Prémios Nobel em 1915), em 2014 assinalam-se igualmente os 50 anos da atribuição do Prémio Nobel a Dorothy Hodgkin (pelo seu trabalho nas estruturas da vitamina B<sub>12</sub> e penicilina), e os 400 anos da observação de simetria em cristais de gelo por Kepler, em 1611.

Esta celebração foi uma oportunidade única para estudantes, professores e investigadores não só dos Departamentos organizadores (Química e Ciência dos Materiais da FCT-UNL), mas igualmente de outras instituições onde o evento foi oportunamente divulgado.

Depois da série de conferências que tiveram lugar em 2014 na FCT-UNL, em 2015 seguem-se dois notáveis oradores: a Professora Ada Yonath (investigadora do *Weizmann Institute of Science* em Israel, galardoada com o Prémio Nobel em 2009 pelos seus estudos na estrutura e função do ribossoma) e o Professor Brian Kobilka (da *Stanford University School of Medicine* nos EUA, galardoado com o Prémio Nobel em 2012, pelos seus estudos sobre receptores acoplados à proteína G).

Em 2014, além de vários cientistas de reconhecido mérito internacional, destacamos a visita do Professor Robert Huber (laureado com o Prémio Nobel em 1988 e Doutor



Fotografia de grupo da Comissão Organizadora com os oradores da sessão inaugural no dia 2 de Abril de 2014. Da esquerda, para a direita: Teresa Santos Silva, Ana Luísa Carvalho, Maria Arménia Carrondo, Claude Lecomte, Maria João Romão, Maria Ondina Figueiredo e João Pedro Veiga. Fotografia cedida por Mário Sousa (Laboratório de *e-learning*, FCT-UNL)

*Honoris Causa* pela Universidade Nova de Lisboa de Lisboa), do Professor Sir Tom Blundell (*Fellow of the Royal Society*) e do Professor Claude Lecomte (vice-Presidente da União Internacional de Cristalografia e representante da UNESCO). O Professor Lecomte proferiu a palestra inaugural no dia 2 de Abril, seguido das intervenções das Professoras Maria João Romão, Maria Ondina Figueiredo e Maria Arménia Carrondo. Seguiu-se um Porto de Honra, também com a presença da Doutora Elisabeth Silva, responsável pelo Sector das Ciências da Comissão Nacional da UNESCO-Portugal.

No dia 23 de Junho foi inaugurada a exposição temática “Cristalografia para a Humanidade”, na presença do Professor Robert Huber e do Professor Fernando Santana (Director da FCT-NOVA). Esta exposição, ainda patente em 2015, resultou dos esforços de coordenação científica de membros dos Departamentos de Química, Ciência dos Materiais, Matemática, Ciências da Terra e Conservação e Restauro da FCT-UNL, com o objectivo de divulgar a contribuição da Cristalografia em diversas áreas do desenvolvimento científico e tecnológico actuais.



A exposição “Cristalografia para a Humanidade”, patente na FCT-UNL, e o Professor Robert Huber (Prémio Nobel da Química em 1988 e Doutor *Honoris Causa* pela Universidade Nova de Lisboa), autografando o painel referente à atribuição do seu Prémio Nobel. (Fotografias cedidas por Luís Gomes)

Em 2014 a Cristalografia esteve ainda presente no *workshop* “O Melhor da Cristalografia em 180 minutos” (incluído no evento VII Encontro Nacional de Estudantes de Bioquímica, ENEBIOQ, 12-13 Abril), e na primeira edição do curso ISBIO2014 (*Integrative Structural Biology tools for the study of protein-ligand interactions*) um curso INSTRUCT, 6-12 Outubro), que decorreram no Departamento de Química da FCT-UNL.

De destacar igualmente o concurso de fotografia, aberto à participação do público em geral, sob o tema ‘Cristais & Simetria na Arte, na Ciência e na Vida’. Num processo de avaliação e selecção iterativa das 56 fotografias recebidas e admitidas a concurso, o júri procurou eleger os trabalhos que associassem os conceitos propostos (cristais e/ou simetria) à originalidade e qualidade fotográfica do trabalho a concurso. Foram atribuídos três primeiros prémios monetários, com valores de 300€, 200€ e 100€, respectivamente, assim como uma menção honrosa, no valor de 50€.

A Comissão Organizadora dos vários eventos teve igualmente a oportunidade de contribuir para a iniciativa dos CTT de lançamento de uma colecção de selos alusiva às celebrações.

Por iniciativa da Comissão Organizadora foi também lançada uma colecção de postais com ilustrações de Benedita Pinheiro, investigadora do grupo de Cristalografia de Proteínas da FCT-UNL.



Envelope carimbado à data de lançamento da emissão portuguesa de selos alusivos ao Ano Internacional da Cristalografia, por iniciativa dos CTT-Portugal. *Design* de Pedro Antunes



Colecção de postais comemorativos do Ano Internacional da Cristalografia na FCT-UNL. *Design* de Violeta Pereira com ilustrações de Benedita Pinheiro

Tratou-se de um conjunto de iniciativas inéditas que não seriam possíveis sem o apoio financeiro de várias entidades, como a Fundação para a Ciência e a Tecnologia (através do Programa FACC), a Direcção da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa e várias empresas nacionais e internacionais.

#### A Comissão Organizadora:

**Maria João Romão** (Professora Catedrática da FCT-UNL e Presidente do Departamento de Química), **Ana Luísa Carvalho** (Investigadora UCIBIO-REQUIMTE, Departamento de Química, FCT-UNL), **Teresa Santos Silva** (Investigadora FCT, UCIBIO-REQUIMTE, Departamento de Química, FCT-UNL), **João Pedro Veiga** (Professor Auxiliar, CENIMAT, Departamento de Ciências dos Materiais, FCT-UNL).

#### Patrocinadores:

Bruker, S. A.; Rigaku; Dias de Sousa, S. A.; Paralab; PANalytical; LaborSpirit; Izasa; Grupo Taper/Zeiss; VWR; STAB Vida

#### Links:

<http://xtal.dq.fct.unl.pt/iycr2014/>

<https://www.facebook.com/IYCr2014NOVA>

<http://www.unesco.org/new/en/natural-sciences/science-technology/basic-sciences/infocus-bes/international-year-of-crystallography-2014/>

<http://unesdoc.unesco.org/images/0022/002209/220914e.pdf>

<http://www.iycr2014.org>

<http://www.ctt.pt/contentAsset/raw-data/5d20d85f-44f1-407a-991e-e2aba4ae675a/ficheiroPdf/export/Pagela%20Cristalografia.pdf>



## FILIFE A. ALMEIDA PAZ

### MEDALHA VICENTE DE SEABRA 2014



ENTREVISTA CONDUZIDA POR  
PAULO MENDES

O Doutor Filipe A. Almeida Paz foi galardoado com a Medalha Vicente de Seabra 2014. Este prémio, instituído pela Sociedade Portuguesa de Química em 2002, tem como objectivo o reconhecimento de investigadores de idade não superior a 40 anos que tenham realizado em Portugal trabalho de investigação em Química com um elevado grau de qualidade, originalidade e autonomia. O Doutor Filipe Paz tem desenvolvido trabalho de investigação na área dos *Metal-Organic Frameworks*. Nesta entrevista temos oportunidade de conhecer o percurso e a motivação que conduziram a esta distinção, bem como as perspectivas futuras de desenvolvimento da sua carreira.

**Parabéns pela obtenção da Medalha Vicente de Seabra, atribuída pela SPQ como reconhecimento da qualidade, da originalidade e da autonomia do trabalho de investigação que realizou até à data. Era uma distinção que almejava? Como recebeu esta notícia?**

Antes de mais, gostaria de agradecer-lhe o convite para esta entrevista para a revista da Sociedade Portuguesa de Química e agradecer não só a si como também à própria sociedade por esta distinção. Trata-se de um reconhecimento que não esperava e que muito me honra, especialmente vindo do leque de prestigiados cientistas que compõem a Sociedade Portuguesa de Química. Recebi a notícia directamente da Professora Maria José Calhorda, que teve a enorme gentileza de me telefonar a comunicar o resultado do painel de selecção da Medalha Vicente de Seabra. Como pode bem imaginar fiquei radiante pois trata-se de um reconhecimento na minha área de conhecimento e investigação científica.

**Ao longo da sua jovem carreira científica já recebeu alguns prémios. De que modo estes reconhecimentos, em particular a recente distinção da SPQ, contribuem para o desenvolvimento do seu trabalho?**

Um prémio sabe sempre bem, especialmente se é o corolário de um esforço continuado ao longo dos anos e o reconhecimento desse mesmo esforço. Tive a sorte de ter recebido prémios em alturas certas da minha vida pessoal e profissional. Por exemplo, no final do ensino secundário, a meio da minha licenciatura e no final do doutoramento. Esses prémios actuaram essencialmente como catalisadores para continuar a dedicar-me de corpo e alma aos meus objectivos profissionais, demonstrando que realmente com empenho e dedicação o que sonhamos pode ser alcançado. Ajudaram, também, a que eu estabelecesse metas ainda

mais ambiciosas para os anos seguintes. A Medalha Vicente de Seabra, além de também ajudar a divulgar o meu trabalho científico, vem uma vez mais elevar a fasquia para os próximos anos, o que é algo que acato com bastante gosto.

**Em 2000 obteve a Licenciatura em Química Analítica pela Universidade de Aveiro, tendo imediatamente iniciado estudos de Doutoramento sob supervisão do Professor Jacek Klinowski da Universidade de Cambridge, na área dos Materiais Híbridos Orgânico-Inorgânico. Como surgiu o interesse ou a oportunidade de realizar o Doutoramento fora de Portugal e nesta área de investigação?**

Durante todo o meu período de escolaridade, incluindo a Universidade, nunca saí de casa. No final da Licenciatura sabia que precisava de um desafio e queria também fazer um doutoramento e, dessa forma, o ideal seria ir para o estrangeiro continuar os meus estudos. Na altura fui falar com o Professor João Rocha, que apenas me tinha dado uma disciplina na Licenciatura mas cujas aulas eram tão dinâmicas que contagiavam qualquer aluno. Indicou-me que poderia colocar-me em contacto com o Professor Klinowski em Cambridge, o seu antigo orientador de doutoramento. Como pode bem imaginar, para um recém-licenciado de 21 anos estudar em Cambridge é um sonho tornado realidade e, por isso, decidi nesse momento que o meu futuro passaria muito certamente por Inglaterra. Não esqueço por isso a importância que o Professor João Rocha teve nessa fase da minha vida, e que muito agradeço.

Quanto ao tema de doutoramento a história não é tão linear. Uma das grandes vantagens de Cambridge e, em particular, do Professor Klinowski é a liberdade científica dos seus alunos. De facto, ele incentivava a que os seus alunos fossem completamente independentes, tão independentes ao ponto de poderem decidir onde realmente queriam dar um contributo na Ciência. Depois de estar em Cambridge uns

meses, trocar umas ideias com ele e ler a revista *Nature* sentado nas poltronas da biblioteca do Departamento de Química, descobri os MOFs (*Metal-Organic Frameworks*) que aguçaram a minha curiosidade. Quando disse ao Professor Klinowski que gostaria de começar a fazer umas sínteses no laboratório para ver se descobria algum MOF novo lembro-me como se fosse hoje da resposta dele: “*Brilliant! Go ahead.*”



Que importância teve a sua experiência em Inglaterra na definição e desenvolvimento do seu percurso científico?

Como todos os doutoramentos tive também no meu alguns sobressaltos, mas acabei por descobrir que Cambridge é um local maravilhoso e penso que o Professor Klinowski tornou-o único. Ele sempre foi, e sempre será um cientista no seu verdadeiro sentido da palavra: o que o move é a curiosidade e a descoberta. Ele nunca se preocupou muito com questões burocráticas ou até mesmo financeiras. Por isso, tive o prazer de ter um verdadeiro cientista como orientador de doutoramento. E isso marcou-me profundamente. Ainda hoje vivo a investigação de forma apaixonada, e um artigo não é apenas um artigo, tem que levar algo de mim, tem que ter um pouco dessa paixão. Acredito que como é a paixão e curiosidade que me movem no mundo científico, acabo sempre por querer fazer coisas novas e isso vai ajudando-me no percurso do dia-a-dia.

Ainda em 2004 regressou a Portugal como investigador auxiliar do CICECO, no grupo de Nanomateriais Inorgânicos Funcionais e Híbridos Orgânico-Inorgânico. Foi uma decisão planeada ou foi uma oportunidade?

Foi apenas uma oportunidade que surgiu. Portugal durante muitos anos não contratou investigadores e com o aparecimento dos Laboratórios Associados surgiu investimento nessa área. Surgia assim a oportunidade para entrarmos no mundo Universitário, fazer investigação e podermos permanecer e evoluir para uma eventual carreira docente, algo que infelizmente nunca aconteceu. Voltar a Portugal foi então mais um desafio para mim, tanto mais que quando soube da possível contratação de investigadores não tinha

ainda terminado o meu doutoramento. Em pouco mais de três meses (com o período Natalício pelo meio) escrevi a tese e defendi para poder regressar a Portugal e concorrer ao lugar que iria abrir no CICECO. Foi um feito considerável, e aqui tenho de agradecer uma vez mais ao Professor Klinowski por me ter ajudado a conseguir, em tão pouco tempo, concluir o doutoramento. Olhando para trás vejo, uma vez mais, que foi a paixão que me moveu e fez regressar sem nada certo e sem nenhum concurso aberto.

Ao voltar a Portugal, que diferenças que encontrou nas condições oferecidas, comparando com as que teve durante o período que passou em Inglaterra?

O Departamento de Química da Universidade de Aveiro tem vindo ao longo de muitos anos a beneficiar de uma visão progressista de algumas pessoas e, por isso, houve um grande investimento em termos de equipamento. Além disso, e dentro do CICECO, temos acesso a quase todas as técnicas de caracterização de uma forma “*free of charge*”. Esta visão progressista fez com que as condições que encontrei fossem excelentes para fazer Investigação, em nada ficando atrás do que se passava em Cambridge onde, aliás, o acesso a muitos instrumentos era e continua a ser limitado. Ironicamente cheguei a fazer várias análises em Aveiro para o meu doutoramento porque em Cambridge os equipamentos eram “privados”.

Fale-nos da experiência que tem tido enquanto investigador auxiliar do CICECO. Quantas pessoas constituem actualmente o grupo? Quais têm sido os principais desafios? Como caracteriza o actual acesso ao financiamento na área que escolheu para desenvolver a sua actividade de investigação?

Apenas conheço outras realidades em Portugal por conversa com colegas pois estou no CICECO desde 2004 como já referiu. Dentro do Laboratório tenho tido todas as condições necessárias para fazer investigação, e quando surgem dificuldades a Direcção sempre foi muito aberta a novas sugestões para a resolução desses mesmos problemas. Esta mentalidade e abertura permitiu-me construir um grupo que, actualmente, possui cerca de oito pessoas em plena actividade (cinco pós-doutorandos e três alunos de doutoramento). O grande desafio actualmente é lutar contra o pessimismo generalizado quanto ao futuro na, e da própria,



Ciência. Isto tem consequências muito vastas, desde a redução do número de alunos que pretende prosseguir para doutoramento até à falta de bolsas de investigação tanto para recém-doutorados como para recém-licenciados. Ora, isto leva a uma enorme incerteza quanto ao próprio futuro dos Investigadores que apesar de conseguirem via projectos ir financiados alguns alunos, têm, no dia-a-dia, bem presente a escassez de financiamento. Isto tem consequências muito graves para o nosso futuro científico pois para além de parar o processo de transferência de conhecimento de uma geração de alunos para a seguinte, faz com que se deixe de acompanhar a linha da frente em termos de investigação. Portugal demorou muito tempo a conseguir conquistar o lugar que hoje possui na Ciência e com a tendência actual de financiamento é muito certo que vamos deixar essa conquista esvair-se.



Realiza grande parte da investigação na área dos MOFs. Quais os aspectos mais relevantes em termos científicos e benefícios para a sociedade que a investigação nesta área pode trazer?

A investigação em MOFs continua muito focada na descoberta de novas estruturas cristalinas. Um cientista tem de ser curioso por natureza e trabalhar nesta área é maravilhoso: podemos ter estruturas novas todos os dias! No entanto, olhando friamente para os MOFs, temos realmente de os tornar úteis para a sociedade, não apenas para fazer uma “coleção de selos” de estruturas cristalinas. O grande desafio nos próximos anos está no processamento dos MOFs em materiais funcionais, e para isso temos de conseguir produzir materiais em grandes quantidades, de forma barata e rápida, através de métodos sustentáveis e, de preferência, conseguir controlar o tamanho dos cristais para os podermos processar. Cada um destes passos é só por si difícil, juntar tudo numa família de compostos é realmente um grande desafio. Neste momento os MOFs surgem como uma grande esperança na adsorção e armazenamento de gases. O facto de podermos controlar via Química Orgânica a presença de grupos funcionais nos poros de MOFs porosos, ajuda muito a incrementar a capacidade de adsorção de gases, muito mais do que em materiais do tipo ze-

ólito, por exemplo. Por isso, neste momento, a aplicação de MOFs a problemas da sociedade está ainda numa fase embrionária mas existe um enorme potencial por explorar. Tenho a certeza de que se falarmos daqui a dez anos, o campo de investigação destes materiais estará completamente mudado no sentido da sua utilização na produção de materiais e dispositivos, e não tanto na descoberta de novas estruturas.

Para além das inúmeras e apelativas estruturas adoptadas pelos MOFs, é nas propriedades que estes materiais podem oferecer que concentra a sua atenção. Que propriedades está mais interessado em explorar? Que descobertas/avanços científicos gostaria de anunciar num prazo de 5-10 anos?

Há vários anos que tenho vindo a focar a minha atenção no uso de polifosfonatos coordenados a iões lantanídeo para formar MOFs com grande estabilidade térmica e mecânica. O objectivo é mesmo esse: apontar para aplicações futuras. A presença de iões lantanídeos permite obter MOFs fotoluminescentes cujas propriedades de absorção e emissão de luz dependem fortemente das moléculas orgânicas que usamos. Além disso tenho a sorte de ter como colaborador no CICECO o Professor Luís Carlos que é uma autoridade na área da fotoluminescência de lantanídeos e, por isso, o estudo destes materiais é muito facilitado. Mas estamos também interessados em usar os mesmos materiais como catalisadores heterogéneos, e mais recentemente para separação de misturas de gases como é o caso do dióxido de carbono e metano. Os MOFs que estudamos permitem, por isso, combinar uma enorme quantidade de funcionalidades na mesma rede. Por isso, um dos nossos grandes objectivos é conseguir desenhar um material robusto, de fácil preparação e que combine todas estas propriedades. Um dos grandes objectivos seria, por exemplo, conseguir acompanhar processos catalíticos ou de separação de gases através de luz.

No seu currículo, é interessante notar que, apesar de um número notável de publicações científicas, não possui patentes registadas. Não sente necessidade de patentear os resultados científicos obtidos?

Pessoalmente não vejo o acto de patentear como uma questão de necessidade. A minha investigação tem-se centrado



muito em aspectos fundamentais da Ciência, muito motivada pela curiosidade como referi anteriormente. Daí que a paixão tem-se relevado via publicações científicas. As patentes tornam-se necessárias em actividades científicas centradas na indústria e como não tenho seguido por esse caminho nunca pensei em fazer uma patente. No entanto, confesso, já me ouvi falar em patentes várias vezes no último ano. Quando descobrir o material que referi anteriormente poderá ser o momento em que me decida patentear algo.

**Para além do trabalho de investigação, está também envolvido noutras vertentes. Gostaria de referir-se sumariamente a essas actividades e a satisfação pessoal que retira de cada uma delas?**

Ao longo dos anos fui participando em actividades e actos paralelos à Investigação no Departamento de Química. Penso que a minha maior contribuição tem sido na Comissão de Segurança do Departamento, da qual faço parte há já sete anos. Confesso que é uma actividade muito desgastante porque, infelizmente, muitas vezes somos vistos como “maus polícias” quando a nossa intenção é simplesmente ajudar e evitar acidentes. No entanto o exercício desta actividade ajudou-me muito a ter uma boa ideia do que se faz no Departamento e como diferentes pessoas podem ter uma solução diferente, mas igualmente boa, para um problema comum. Constatado também que, ao contrário do que muitas pessoas dizem, as novas gerações estão mais conscientes do que se pensa sobre problemas de segurança laboratorial. Preocupam-se em trabalhar bem e conhecer as regras. Infelizmente são, em geral, as pessoas mais velhas que mais facilitam.

**Estando ainda no início da sua carreira científica, e tendo chegado já a um patamar elevado em termos de produção científica, que ambições e projectos profissionais tem para o futuro? Gostaria, por exemplo, de ingressar na carreira académica ou prefere continuar na carreira de investigação em exclusividade?**

Há já algum tempo que pretendo um novo desafio pessoal, que seria efectivamente passar para a carreira docente numa Universidade. Ensinar é um dos meus grandes objectivos pessoais, já desde o tempo de estudante. Por isso acho natural continuar a almejar por esta via profissional. No entanto e, como já lhe referi anteriormente, o processo de



transição da carreira de investigação para a de docente é, na prática, inexistente. Justiça seja feita, há apenas alguns casos muito isolados de investigadores que passaram para docentes, mas são muito raros. Culpo completamente as Universidades por esta enorme falta de visão para o futuro, onde não existe renovação e inclusão de novos membros. Os Investigadores mais experientes estão também a ficar velhos (contra mim falo) e quando os colocarem em frente a uma sala de aulas o *gap* geracional de que tanto já se fala para o actual corpo docente vai continuar a permanecer. Uma Universidade é tão boa quanto melhor for o seu ensino, não nos podemos esquecer disso. Novas ideias e novo sangue são sempre uma boa combinação.

**Que mensagem gostaria de deixar aos jovens investigadores portugueses que estão a realizar os seus trabalhos de doutoramento e ambicionam prosseguir uma carreira de investigação de alto nível?**

Aos meus alunos costumo dizer sempre a mesma coisa: façam o melhor que conseguirem, com paixão e dedicação e colocando sempre a fasquia o mais alto que puderem; quando se tentam superar diariamente conseguem feitos que nunca pensariam atingir. No final serão esses feitos que contarão. Também não os deixo justificarem-se por estarem em Portugal. Somos um país pequeno e periférico, é verdade, mas somos tão bons como os investigadores de qualquer outro país mais rico da Europa.

**Como vê o futuro destes jovens investigadores, nomeadamente no contexto do recente processo de avaliação das unidades I&D por parte da FCT?**

O processo de avaliação comandado pela FCT já passou e, nesta fase, de pouco importa continuar a insistir nos erros que foram feitos. O processo veio, no entanto, relembrar um problema que temos há muitos anos em Portugal: não existe uma assimilação de doutorados por parte do tecido empresarial. As razões são diversas mas, efectivamente, o número de doutorados a transitarem para empresas tem sido muitíssimo baixo. Pessoalmente acho que isto é um erro enorme por parte das empresas: não existem jovens mais bem preparados, capazes de resolver problemas e até de trabalhar de forma autónoma do que aqueles que concluem estudos de pós-graduação, particularmente um doutoramento. Com o desaparecer de muitas unidades de investigação acredito que muitos destes jovens começarão a ser mais activos na procura de lugares na indústria e espero, sinceramente, que os empresários tenham uma maior abertura para a sua contratação. Saúdo, por exemplo, a recente iniciativa do Governo para as regiões em que se irão colocar 1200 doutorados em ambiente empresarial. Espero que seja uma de muitas iniciativas do género.

**É oriundo de Oiã, Oliveira do Bairro. Como caracteriza as gentes Bairradinas? O leitão, a chanfana e o vinho da Bairrada costumam fazer-lhe companhia à mesa?**

Apesar de ter nascido em Oiã vivi quase toda a minha vida em Águeda, uma cidade a cerca de 20-30 km de Aveiro e

muito focada na indústria. Por isso posso falar muito melhor do que é viver numa cidade industrial, orientada para a produção de ferragens, bicicletas e indústria de moldes e ferramentas do que propriamente da vida na Bairrada. No entanto, o leitão é algo que não nos escapa à mesa, especialmente em épocas festivas e data assinaladas. É muito comum degustarmos esta bela iguaria quando queremos festejar algo em família. Curiosamente raramente bebo vinho, não é do meu hábito. Mas tenho sempre em casa uns belos exemplares da Bairrada para abrir quando amigos nos visitam.

A entrevista chegou ao fim. Muito obrigado pelo tempo disponibilizado e uma vez mais parabéns pelo Prémio. Já agora, e fazendo uma ligação improvável entre Pedro Abrunhosa e os MOFs, “Que nunca caíam as pontes entre nós”.

Obrigado eu por esta oportunidade.

## NOTA BIOGRÁFICA

Filipe A. Almeida Paz nasceu em Oiã, Oliveira do Bairro, em 1978. Licenciou-se em Química Analítica na Universidade de Aveiro em 2000. Em 2001, depois de ter sido premiado com uma bolsa de mérito da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), foi estudar para a Universidade de Cambridge (*Peterhouse College*) Reino Unido, com vista à obtenção do Doutoramento sob a supervisão do Professor Jacek Klinowski. No final do mesmo ano obteve o certificado de estudos de pós-graduação e, em 2004,

obteve o grau de Doutor em Ciências Naturais com o trabalho “Novel Organic, Inorganic and Hybrid Frameworks”. Ainda no mesmo ano, regressou a Portugal e à Universidade de Aveiro como Investigador Auxiliar do Centro de Investigação em Materiais Cerâmicos e Compósitos (CI-CECO) onde se mantém até hoje. Com cerca de 280 artigos publicados em revistas internacionais citados no Science Citation Index (SCI) e cinco capítulos de livros, os seus interesses de investigação situam-se na área da concepção e desenvolvimento de novos *Metal-Organic Frameworks* (MOFs) e no uso da cristalografia de raios-X para resolver problemas químicos. Para além do trabalho de investigação, que inclui a supervisão de vários estudantes de mestrado, doutoramento e pós-doutoramento, coordenação e membro de equipa de vários projectos financiados, encontra-se também envolvido, na Universidade de Aveiro, em actividades de docência do terceiro ciclo, gestão e extensão universitárias. Para além da Medalha Vicente de Seabra, atribuída recentemente pela Sociedade Portuguesa de Química, e da bolsa de mérito da FCT que lhe permitiu obter o Doutoramento na Universidade de Cambridge, o Doutor Filipe Paz obteve ainda outros prémios ao longo do seu percurso académico, nomeadamente: Melhor Poster no *23<sup>rd</sup> Congress and General Assembly of International Union of Crystallography* em 2014; *Muir Wood Award in Science*, na Universidade de Cambridge, em 2004; *Dow Portugal Award* (melhor estudante) na Universidade de Aveiro, em 2000; *Mérito escolar na área das Ciências*, na Universidade de Aveiro, em 1999; Prémio Egas Moniz do Governo Civil de Aveiro (melhor estudante), na Universidade de Aveiro, em 1998.

## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

### CLOROFÓRMIO REVISITADO

A existência de super-dipolos no clorofórmio, descobertos por investigadores no Reino Unido, poderá explicar a capacidade deste solvente para dissolver uma grande variedade de compostos em concentrações elevadas.

O clorofórmio é um dos solventes mais utilizados em química, usado vulgarmente por exemplo nos processos de extracção de produtos naturais, em reacções químicas e em espectroscopia de RMN. As suas propriedades notáveis continuam a chamar a atenção dos investigadores.

Recentemente, uma equipa de investigadores da UCL (*University College London*), no Reino Unido, liderada por Christoph Salzmann, usou a difracção de neutrões para uma melhor compreensão da estrutura microscópica do clorofórmio líquido. A equipa revelou que uma elevada percentagem de moléculas de clorofórmio forma agregados moleculares com momentos dipolares superiores ao das moléculas de clorofórmio individuais. Estes “agregados super-dipolo”, como foram designados, induzem uma forte polarização das nuvens electrónicas das moléculas de soluto vizinhas, tornando energeticamente mais favoráveis os processos de extracção e dissolução.

Maxim Fedorov, da Universidade de Strathclyde no Reino Unido, especialista na modelação de interações moleculares, referiu que “o trabalho melhora a compreensão do estado líquido da matéria” e “prova que a visão comum sobre os líquidos como um meio sem estrutura é bastante simplista, mesmo para uma pequena molécula como a do clorofórmio.”

A equipa de investigação espera que este novo conhecimento possa ser aproveitado para criar novos solventes, mais ecológicos e de elevado desempenho, criando deliberadamente super-dipolos em outros líquidos.

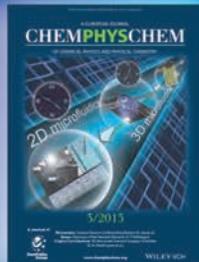
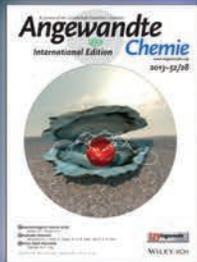
(adaptado de “Super-dipoles linked to chloroform’s outstanding solvent properties”, <http://www.rsc.org/chemistry-world/2015/01/super-dipole-chloroform-solvent> e de J.J. Shephard, A.K. Soper, S.K. Callear, S. Imberti, J.S.O. Evans, C.G. Salzmann. *Chem. Commun.* (2015) DOI: 10.1039/C4CC09235J)

**Paulo Mendes**  
([pjgm@uevora.pt](mailto:pjgm@uevora.pt))

# New Journal

**ChemElectroChem**

is a sister journal of:



**Co-Chairs of the  
Editorial Advisory Board:**



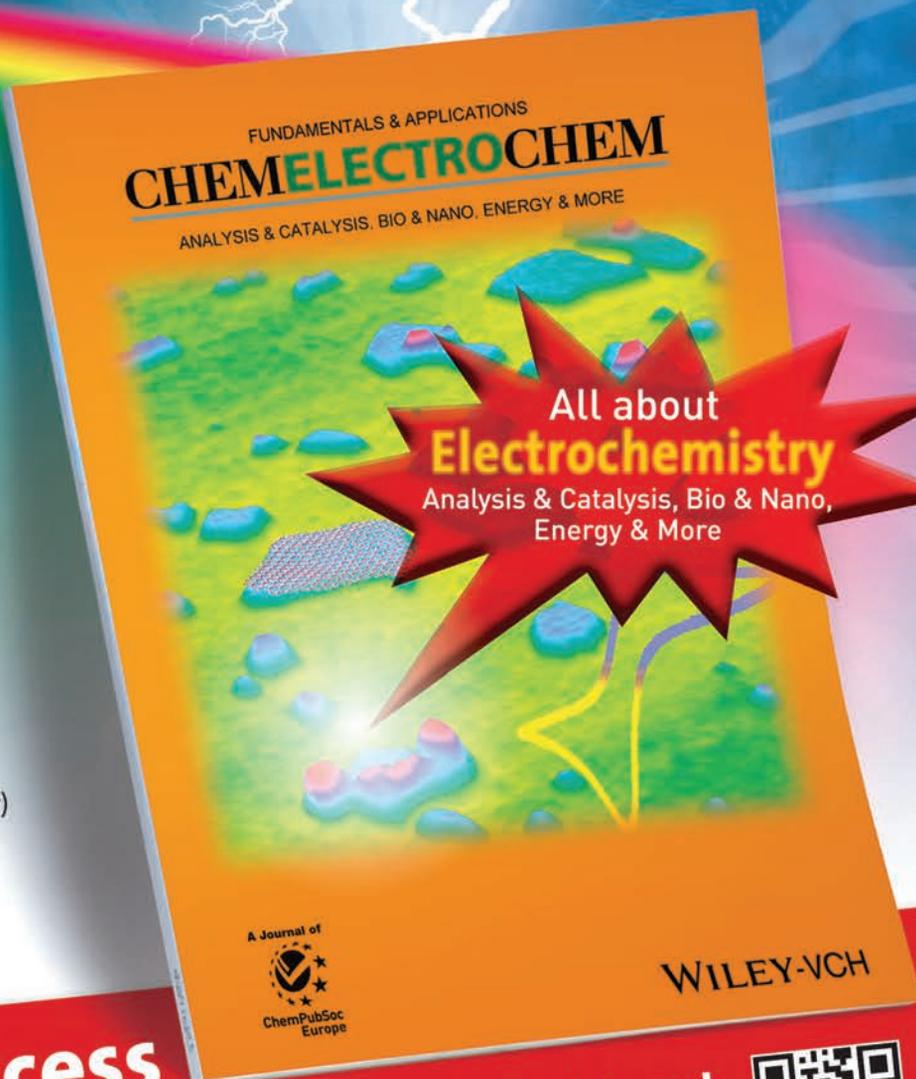
**Bing-Wei Mao**  
(Xiamen University, China)



**Wolfgang Schuhmann**  
(Ruhr-Universität Bochum, Germany)



**Jean-Marie Tarascon**  
(Université de Picardie, France)



## Free Online Access

In 2014 for all users from institutions that have registered

Ask your librarian to register for complimentary online access TODAY  
[www.wileyonlinelibrary.com/newjournals-optin](http://www.wileyonlinelibrary.com/newjournals-optin)



**ChemElectroChem**

is a journal of ChemPubSoc Europe –  
an organization comprising  
16 European chemical societies.

[www.chempubsoc.eu](http://www.chempubsoc.eu)

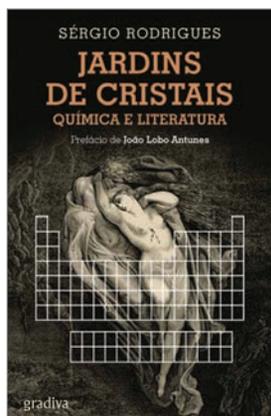


[www.chemelectrochem.org](http://www.chemelectrochem.org)

WILEY-VCH

## JARDINS DE CRISTAIS - QUÍMICA E LITERATURA

Jorge Calado\*



**Autor:** Sérgio Rodrigues

**Prefácio:** João Lobo Antunes

**Editora:** Gradiva, 2014

**N.º de Páginas:** 276

**ISBN:** 978-989-616-594-9

“Jardins de Cristais”: eis um belo título para um belo livro sobre a presença especial da química na literatura. Sérgio Rodrigues começa a obra debatendo duas ideias fortes: por um lado, a *centralidade* da química; por outro, a sua paradoxal *invisibilidade* nos dias de hoje. Tal dialéctica atravessa, dum ponta à outra, “Jardins de Cristais”. Fica a pergunta: como é que a química pode ficar invisível sendo tão central? Mal comparado, é como se o Sol fosse invisível no nosso mundo... Mesmo assim a química continua bem presente no discurso literário, e penso que foi esta riqueza química da literatura que o levou a escrever “Jardins de Cristais”. Para Sérgio Rodrigues, a química é *antropocêntrica*. Está centrada no corpo humano, no homem e na mulher. Daí que uma boa parte da discussão e a maior parte dos exemplos se referam à iatroquímica (a química do tratamento e da cura) e à farmacologia. Mas a química é também uma ciência *central* porque dialoga e interaccua, à esquerda e à direita, com a matemática, a física, a mineralogia e geologia, a meteorologia, a biologia, etc. Nenhuma outra ciência possui tantas valências. Por outro lado, a química é a ciência mais *fértil*, isto é, aquela que tem gerado mais ciências. Citando Jacques Bergier, Rodrigues afirma que “quando a química tem uma ideia inovadora, esta se autonomiza logo como uma nova ciência, sendo exemplos a biologia molecular e a química nuclear”. Sempre foi assim. A termodinâmica e a electricidade começaram como ramos da química. Humphry Davy e Michael Faraday eram químicos. John Dalton foi professor de James Joule. Ernest Rutherford ganhou o Prémio Nobel de Química em 1908 “pelas suas investigações da desintegração dos elementos e da *química* das substâncias radioactivas”. A química inventa e vai à vida; a física, mais colonialista, descobre e apropria-se. O autor lembra-nos que todos os dias se descobrem ou são inventadas mais de 15 000 substâncias químicas, e que no *Chemical Abstracts* estão já registadas mais de 90 milhões de substâncias. Entretanto, a electricidade, a termodinâmica, etc. passaram a ser vistas como disciplinas da física, e a química nuclear metamorfoseou-se em física nuclear.

Esta característica – gerar e largar, como a Mãe-Natureza faz com as suas crias, ensinando-as a ser independentes –

contribuiu para a tal *invisibilidade* da química, de que se queixa o autor. Mas a invisibilidade é mais um aspecto da sua centralidade. Não pensamos nela porque está em todo o lado, como o ar (que também não é visível, mas se sente). O corpo humano é uma sociedade organizada de células e um compósito de substâncias químicas em interacção. E cá temos Sérgio Rodrigues a explicar que “Adormecemos com o auxílio da adenosina e da melatonina, e sonhamos com o da acetilcolina, memorizamos com a ajuda da proteína CREB e esquecemos com a da anandamida”. Quando tudo está bem, não sentimos o corpo. Se o estômago, a coluna, os dentes dão o alerta, doendo – é sinal de que temos de ir ao médico, ao ortopedista ou ao dentista. A química também é assim: só damos por ela quando nos faz mal ou quando recorremos a ela para resolver problemas ou temperar a comida (venha lá mais uma pitada de cloreto de sódio!). Parte do problema está no desvio ao significado da palavra. Hoje, quando ouvimos falar de químicos sabemos que, em geral, não se estão a referir a uns sujeitos de bata branca mas sim a produtos (químicos) nocivos. E se o químico (cientista) pode merecer algum respeito, ‘os químicos’ (plural) são referidos depreciativamente ou com desconfiança. Como eu costumo dizer, “um químico também é feito de químicos”. Não há que ter medo dos ‘químicos’. Já Paracelso alertava que o problema está na dose.

Lidamos com a química todos os dias e a toda a hora (o corpo e a mente humanas funcionam com base na química). O problema é que sucede com a química aquilo que se dizia da pedra filosofal e também da felicidade: passamos por ela sem a ver. Daí a sua pretensa invisibilidade. A questão põe-se ao professor (de química) – e também se devia pôr ao político – por causa das vocações. Como despertar os jovens e os cidadãos em geral para a química? Abro aqui um parêntesis para contar uma história pessoal. Conheci e falei com Mário Soares – um político que muito admiro e a quem perdoo tudo porque também tudo lhe devo como português livre – apenas duas vezes: a primeira, em meados dos anos 1960, no princípio da minha carreira docente no IST, quando fui testemunha abonatória de um dos meus alunos, preso por ‘actividades subversivas’, num daqueles julgamentos plenários no Tribunal da Boa-Hora,

\* jcalado@ist.utl.pt

sendo Soares o advogado de defesa; a segunda, em 1998, quando nos coube proferir as lições plenárias no XXIII Congresso Mundial da Vinha e do Vinho. Foi nesta ocasião que lhe fui apresentado pessoalmente. Não me esqueço da sua reacção: “Não me digam! Outro químico!” Esses eram os tempos em que o lugar de comissário europeu parecia ser monopolizado por engenheiros químicos: um (António Cardoso e Cunha) fora e outro (João de Deus Pinheiro) era-o, na altura. Quatro outros, Lloyd Braga, Fraústo da Silva, Roberto Carneiro, Couto dos Santos (estes dois últimos ex-alunos meus) serviram como ministros de educação. Os químicos propriamente ditos (em oposição aos engenheiros químicos), também se evidenciaram: Victor Crespo chegou a Presidente da Assembleia da República (depois de ter sido ministro da educação), e Júlio Pedrosa de Jesus também foi ministro da educação. (Peço desculpa se, pelo caminho, me esqueci de alguns mais.) Nessa época, a química era politicamente visível e os químicos portugueses desempenharam um papel central na vida do país. No seu livro, Sérgio Rodrigues lembra os casos de Elena Ceausescu (mulher do ditador comunista romeno) e de Frau Merkel, como poderia ter referido os de Maria de Lurdes Pintassilgo (engenhreira química, primeira-ministra de Portugal e candidata à Presidência da República) ou de Mrs. Thatcher (licenciada em química pela Universidade de Oxford). Está por escrever o livro sobre a química e a política! Não será um jardim de cristais, mas talvez uma casa com telhados de vidro.

Se a química é omnipresente na vida e no dia-a-dia, também está na literatura (e na pintura, na ópera, no cinema, etc.). Quanto a escritores, Sérgio Rodrigues chama todos e escolhe muitos, até o inefável José Rodrigues dos Santos, o Dan Brown portuguesinho... Do cordel ao aeroporto, tudo é literatura! Boa e má. Rodrigues encontra a química nos livros fundamentais da história humana (a *Bíblia* propriamente dita e essa outra que é *O Capital*; a *Odisseia* de Homero e a *Divina Comédia* de Dante, etc.), deambula pela química do amor, convoca anjos e demónios, visita novos e velhos infernos e a química do mal (dos paraísos artificiais de Baudelaire aos vampiros de Robert Pattinson), analisa venenos, acidentes e crimes (policiais) e os suicídios dos cientistas, trata da química da poesia e da poesia da química, considera o fantástico, o visionário, o alienante e o desinformante, etc., tudo em capítulos curtos e apelativos que prendem o leitor. Pelo meio há digressões sobre a poluição e contaminações várias, a conservação de alimentos, etc. Só estranhei a ausência dos grandes autores da literatura culinária! Parafraçando o poema de Emily Dickinson citado pelo autor, a química é mais vasta do que o céu, mais profunda do que o mar e tem o peso de Deus!

Cada leitor encontrará os seus favoritos. Para mim, foi especialmente tocante que o autor não se esquecesse da literatura infantil e fosse buscar “O Romance da Raposa”, de Aquilino Ribeiro. Eis o primeiro livro a sério que li, tinha eu cinco anos, e nunca mais esqueci a Salta-Pocinhas, essa “raposeta pintalegre, senhora de muita treta”. Letras são tretas, dizia-se, quando eu era miúdo. Neste livro, a química (solubilidade dos produtos naturais) é uma treta que serve para enganar o lobo velho e mau. De resto, há

os médicos, conhecedores óbvios de química, que foram escritores (Júlio Dinis, Egas Moniz, Miguel Torga, Fernando Namora, António Lobo Antunes, para referir apenas os portugueses), e os escritores que sabiam química, como Camilo Castelo-Branco. Li Camilo cedo demais; “Jardins de Cristais” abriu-me o apetite para o reler – e este é mais um dom da obra em apreço. Gostei que Sérgio Rodrigues nos lembrasse a linguagem alquímica de Camilo (que vinha das farmacopeias) – o ceroto de espermacete e as fezes de ouro – e a sua denúncia da homeopatia, hoje tão actual como há 150 anos: “Não duvidava assegurar-me que dez gotas de *nux* lançadas das Berlengas ao mar podiam converter o oceano num remédio bom para dores de estômago, de cabeça e outras”. Tão bom como a fusão fria de Pons e Fleischmann que resolveria os problemas energéticos da Humanidade! E há – e bem – Vitorino Nemésio (“Limite de Idade”, publicado quando o autor dobrara o cabo dos 70) e António Gedeão, dois heróis da minha juventude, que conheci bem. Falta só o meu mestre, António Herculano de Carvalho, químico, poeta e dramaturgo, tradutor de poesias em quatro idiomas, a quem tanto devo.

Assinalo apenas mais alguns dos meus amores: Camões, Goethe, Primo Levi, Victor Hugo (mas também Shelley e Dickens, que mereciam mais), Oscar Wilde, Robert Musil. A propósito: não será “O Retrato de Dorian Gray” uma bela metáfora das leis da conservação da química? Rodrigues chama a atenção para o começo meteorológico de “O Homem Sem Qualidades”, de Robert Musil, que entre muitas coisas é também um tratado de química-física. O parágrafo inicial é provocador: Musil tinha uma sólida formação científica (o pai era professor de engenharia mecânica), mas descreve condições atmosféricas (temperatura, pressão, humidade) incompatíveis com um belo dia de Agosto em 1913! Espalhadas pelo livro há muitas pérolas que eu desconhecia, como o poema “Psicologia de um vencido”, do brasileiro Augusto dos Anjos. Segundo Sérgio Rodrigues, Anjos “parte da química orgânica da vida para chegar à química inorgânica da morte” (bela frase!). Ou a metáfora do ‘Fogo verde como a erva’ em “Fern Hill”, de Dylan Thomas que, como dizia o outro, não sabia nada de química nem consta que tivesse laboratório. Embora seja impossível prever o futuro, no último capítulo, “A química do futuro”, Rodrigues faz a apologia da química, terminando com uma citação do meu amigo Roald Hoffmann, Prémio Nobel de Química de 1981 e poeta assinalável. Foi Hoffmann quem me incitou a reger cursos como “The Art of Science”. Dá-se ainda a coincidência do poema que abre “The Metamict State” (o seu primeiro livro de poesia, 1987), “The Devil Teaches Thermodynamics”, tratar da minha área de eleição – a termodinâmica. Mas o demónio não sou eu, mas sim a criatura de Maxwell...

Aferimos a importância dos livros que lemos pelo que eles trazem de pessoal. Neste caso senti que tinha sido escrito para mim – e o leitor desculpará assim o autocentrismo desta recensão. Se eu gostei, muitos outros leitores aproveitarão com a leitura de “Jardins de Cristais”. Estou grato a Sérgio Rodrigues por ter escrito este livro, e também por ter traduzido “A História Química de Uma Vela”, onde Michael Faraday, um grande escritor, nos revelou a “chama

molhada” (que é outro motivo condutor de “Jardins de Cristais”). À frente de um bom livro está sempre um grande prefácio. Rodrigues teve a sorte de contar com a clarividência elegante da escrita do Professor João Lobo Antunes. Inevitavelmente retoma-se aqui a discussão das Duas Culturas, iniciada no século XIX por Matthew Arnold em “Literature and Science” (Rede Lecture de 1882) e retomada por C. P. Snow em 1959, noutra Rede Lecture. Arnold teve como opositor T. H. Huxley, o ‘*bulldog* de Darwin’; Snow contou com a

oposição feroz do literato F. R. Leavis. Com uma diferença crucial: Arnold e Huxley eram amigos; Snow e Leavis testavam-se. (Aliás, seria sempre difícil gostar de Leavis.) O próprio Snow tentou deitar água na fervura invocando uma terceira cultura – a das ciências sociais – que colmataria a brecha entre as culturas científica e humanista. A verdade é que a cultura é só uma, e abarca a química, a literatura, as outras ciências, as artes, a filosofia, a vida. “Jardins de Cristais” é um belo exemplo desta cultura.

## MESTRE CARBONO, O CIENTISTA



**Raquel Gonçalves-Maia\***

**Autor:** Filipe L.S. Monteiro

**Ilustrações:** Ana Beatriz Marques

**Editora:** Chiado Editora, colecção “Recreio”, 2015

**N.º de Páginas:** 92

**ISBN:** 978-989-51-2572-2

Muito mais do que o homem, interessa a Humanidade. A ela se dirige “Mestre Carbono, o Cientista”, o drama das alterações climáticas, o aquecimento global, a salvação da Terra. Para isso trabalha Filipe Monteiro, o químico escritor licenciado em Química Analítica pela Universidade de Aveiro, vinte anos de trabalho na indústria química, como director de produção, director de qualidade e no desenvolvimento de novos produtos.

Afinal, o objectivo da Grande Obra alquímica é a aquisição da Pedra Filosofal ou do Elixir da Longa Vida; e, por muito que a alma de cientista de Filipe Monteiro afirme que não é alquimista, eu afirmo que ela é.

Conto de fadas para crianças? Ou uma escrita para adultos, num plano elevado, onde se realça e “manipula”, uma decifração oculta da Natureza? Saberemos nós quem de nós se serve como fonte de energia? E o que fazer quando percebemos a verdade?

“Mestre Carbono, o Cientista” é muito mais do que um texto bem delineado, bem escrito. Filipe Monteiro expressa claramente os seus objectivos: uma homenagem aos homens e mulheres que dedicam a sua vida a “fazer ciência” na busca de um mundo melhor; o alcance dramático das mudanças climáticas à escala global e a premência da salvação do mundo; a descoberta do composto químico salvador; ser cientista.

Todavia, o autor soube bem quanto o seu livro saiu valorizado pela ilustração, a todos os títulos brilhante, de Ana

Beatriz Marques. Como seria possível fazer passar as suas mensagens aos jovens e muito jovens se não existisse um poderoso Mestre Carbono, átomo redondo que nem lua cheia, “elemento robusto”, de olhar sereno e confiante e farto bigode, de grafite feito, a inspirar chefia? E Hidrogénios de mão dada, Oxigénios sonolentos, enxames a compor moléculas, Glicose, Coenzima-A, Clorofila... Microscópios desenhados a preceito, balões, provetas e *erlenmeyers* estilizados e convidativos, três cientistas, uma equipa: Karen, Helena e Roberto. É o desenho de Ana Beatriz Marques que anima “Mestre Carbono, o Cientista”, e permite a tão desejável interligação entre a Ciência e a Arte. Ah, a cultura... Excelente a qualidade!

“Ainda não foi desta”, diz Karen; diz Karen, e diz o átomo de Oxigénio. É uma mensagem de esperança: “Mas vamos de lá chegar”, retorque o Nitrogénio. “Não tenho dúvidas que o iremos alcançar”, diz Roberto. E com o erro se aprende e com muito suor se constrói. “Não repetiremos as ligações erradas”, diz Mestre Carbono.

Como se depreende, para além dos objectivos atrás citados, muitas são as mensagens – algumas muito simples, mas tão fundamentais! – que Filipe Monteiro nos transmite. Lava-se, arruma-se, mantém-se o laboratório operacional. Anota-se, analisa-se, reflecte-se, trabalha-se em grupo. O sono pode ser agitado, mas as motivações são sorridentes.

Retornando ao problema crucial – o apocalipse previsível da extinção da raça humana, se não de todas as raças, se

\* [rmcgonc@gmail.com](mailto:rmcgonc@gmail.com)

mais clorofila não existir para de dióxido de carbono fazer oxigénio – podemos respirar de alívio, ou não?

O problema é tratado em dois níveis paralelos: o macro, a nível humano, e o micro, a nível dos átomos que se comportam como humanos – apenas um pouco mais inteligentes... A metáfora é bem conseguida.

E a originalidade surge, não tanto na temática que já é bem conhecida de todos nós, mas na forma escolhida pelo autor para que ela tenha impacto sobre todos nós: são os “pequeninos” que ensinam os “grandes”; são os átomos que conduzem as investigações da equipa, são os filhos que vão ensinar os pais...

O autor tem plena consciência da dificuldade da tradução escrita desta inversão de poderes. E mais sabe – que nem

sempre conseguiu a interpretação perfeita, porque ela simplesmente não existe...

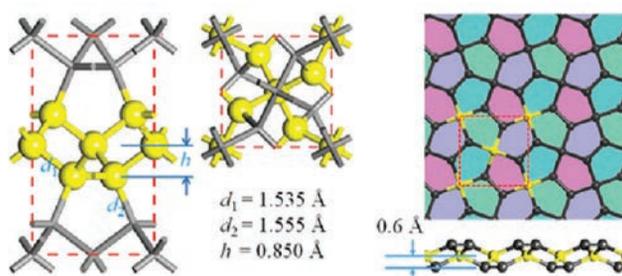
Mas os jovens aprendem, estão cá para isso... E, se não se sentirem familiarizados com certos termos, mais científicos ou mais técnicos, podem sempre recorrer ao glossário que o autor, inspirado, introduziu no livro. E se, mesmo assim, ainda considerarem as explicações insuficientes recorram aos pais, aos professores, aos amigos – ao Filipe! – que todos nós temos o dever de os elucidar, ao mesmo tempo que – quem diria! mais sensibilizados ficaremos para o problema do “efeito de estufa” e suas maléficas consequências.

É muito escasso o trabalho de divulgação científica em Portugal, para mais a nível infanto-juvenil. Aplaudir a ousadia de Filipe Monteiro que, por artes mágicas, nos devolveu o “ar puro” na Terra, é um saudável imperativo.

## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

### CÁLCULOS PREVÊM GRAFENO PENTAGONAL

Investigadores chineses propuseram a existência de um novo alótropo 2D de carbono, constituído por pentágonos, o qual designaram por “penta-grafeno”. Tal como o grafeno, o penta-grafeno consiste numa folha plana de átomos de carbono em que estes se encontram dispostos segundo um padrão pentagonal, originando algumas propriedades físicas interessantes.



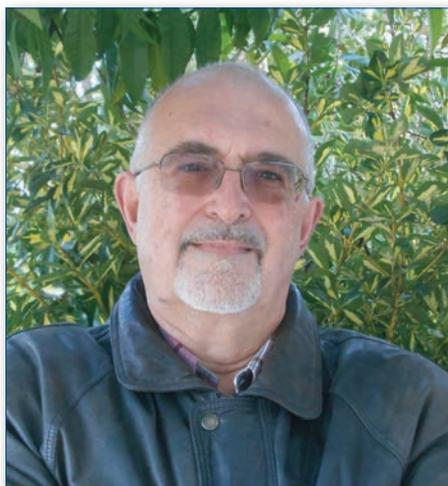
Estudos teóricos realizados pela equipa de investigação mostraram que a versão pentagonal do grafeno será razoavelmente estável e também mais forte e capaz de resistir a temperaturas mais elevadas, até 730° C, do que o grafeno convencional. Além disso, terá propriedades semicondutoras, ao contrário do grafeno convencional que é um condutor altamente eficiente que tem de ser quimicamente modificado para ser transformado em semicondutor. Com esta descoberta, poder-se-á abrir uma porta na produção selectiva de nanotubos de carbono (CNTs) semicondutores uma vez que os métodos actuais de síntese de CNTs a partir do grafeno convencional produzem geralmente uma mistura de CNTs condutores e semicondutores, dependendo da orientação dos hexágonos quando uma folha de grafeno é enrolada. Curiosamente, o penta-grafeno também parece ter propriedades auxéticas, ou seja, ao ser esticado numa determinada direcção, expande quer nessa direcção quer na sua perpendicular, ao contrário do que se observa na grande maioria dos materiais, grafeno convencional incluído, em que se observa uma contracção na direcção perpendicular àquela em que são esticados.

O conjunto destas propriedades sugere uma série de potenciais aplicações para o penta-grafeno, nomeadamente na área da nano-electrónica, biomateriais e em tecnologias espaciais, tal como sugerido por Qian Wang, líder da equipa de investigação. Philip Feng da Universidade *Case Western Reserve*, em Cleveland, Estados Unidos, que trabalha com muitos nanomateriais 2D, espera que o penta-grafeno possa ser sintetizado. “A estrutura é muito intrigante e fascinante”, referiu, acrescentando que “se este penta-grafeno puder ser isolado ou sintetizado, poderá ser outra grande contribuição para a família de estruturas 2D”.

(adaptado de “Calculations predict pentagonal graphene”, <http://www.rsc.org/chemistryworld/2015/02/calculations-predict-pentagonal-graphene> e de Shunhong Zhanga, Jian Zhouc, Qian Wangd, Xiaoshuang Chend, Yoshiyuki Kawazoef, *Puru Jenac. Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **112** (2015) 2372-2377)

**Paulo Mendes**  
(pjgm@uevora.pt)

ALÉM DA ÓBVIA, EXISTIRÁ OUTRA QUÍMICA QUE A COMPLEMENTA, NEM QUE SEJA PELA ATRACÇÃO OU PELA REACÇÃO ÀS COISAS MAIS PROSAICAS E MUNDANAS DA VIDA



Carlos Nieto de Castro

**P**rofessor Catedrático da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. Desde 1 de Janeiro de 2015 é membro integrante do Centro de Química Estrutural da Universidade de Lisboa (IST+FC), Área temática de Termodinâmica de Fluidos e Nanossistemas, Grupo de Termofísica Molecular e Tecnologia de Fluidos.

Possui mais de 35 anos de investigação em termodinâmica e processos de transporte de fluidos e materiais, incluindo questões fundamentais e tecnológicas, de criogénicas para altas temperaturas, de baixas para altas pressões, de elevado nível metrológico. Os interesses científicos abarcam várias áreas, nomeadamente: produtos naturais e sintéticos, química ambiental, equipamentos de transferência de calor e filmes finos; misturas gasosas complexas com impacto energético e ambiental; nanomateriais (sintéticos e naturais), líquidos iónicos e respectivos Ionanofluidos, incluindo estrutura, novos fluidos de transferência e armazenamento de energia calorífica, que contribuem para a resolução de problemas científicos prementes, mas com grande potencial industrial.

#### ENTREVISTA

*Indique-nos um livro, uma música e um filme da sua preferência.*

Livro : *Autobiografia de Agatha Christie*, Editora ASA, 2011

Música : *Imagine*, John Lennon

Filme: *Night Train to Lisbon*, Bille August, 2013

*Rir é o melhor remédio?*

Claro, para quem sabe e consegue. É um acto espontâneo e natural. Corresponde ainda à nossa reacção imediata a comédias teatrais de alta qualidade, em que por vezes só rimos. Veja-se, por exemplo, a peça *A Dama do Maxim*, de Georges Feydeau e com Vera Kolodzig no principal papel,

estreado a 16 de Abril de 2014 pelo Teatro da Terra, de Ponte de Sor, os filmes do nosso saudoso Vasco Santana ou os Simpsons!

*Que instrumentos costuma utilizar para diminuir a pressão do trabalho? Tem algum hobby?*

A minha família, os jogos em computador do Sudoku, e especialmente, quando existem períodos mais longos, os meus comboios eléctricos. A isto junto a minha paixão pelo futebol e pelo meu Glorioso Benfica.

*Qual é a sua temperatura crítica, a partir da qual muda rapidamente de estado e o trabalho tem de dar necessariamente lugar ao ócio?*

A temperatura crítica, no sentido termodinâmico do equilíbrio de fases puras, é o ponto em que deixa de haver distinção entre o estado líquido e o estado gasoso. É o ponto em que a desordem vence a ordem, em que as forças de atracção entre as moléculas são ultrapassadas pelas forças de repulsão. Comigo acontece quando chego à conclusão de estar a ser pouco eficaz e pensar sem clareza. Nesta altura “passo pelas brasas” dez minutos (técnica muito avançada nas empresas/instituições mais eficientes) ou paro e vou para casa, conversar com os filhos ou entro no gabinete de um(a) colega para trocar ideias.

*Na sua relação com a gastronomia, o equilíbrio está mais deslocado para o lado dos sólidos ou dos líquidos? Fale-nos do melhor prato que comeu na vida. Com que tipo de fluido o acompanhou?*

O equilíbrio gastronómico não se pode atingir sem a existência de sólidos e de líquidos. Devem misturar-se (*blend*) muito bem e a proporção relativa depende das propriedades dos sólidos e dos líquidos, bem como das condições ambientais... O melhor prato que comi na vida (e ainda como) é o “Cozido à Portuguesa”, embora muitos pratos de bacalhau não lhe fiquem atrás, assim como os filetes de pescada fresca com molho tártaro. A cozinha portuguesa é notável, seja no sabor seja na criatividade da utilização dos peixes e das carnes. Para acompanhar o cozido ou qualquer prato de bacalhau nunca esquecer o nosso azeite e os nossos vinhos tintos, sejam do Douro, Ribatejo ou Alentejo. Saborear um belo copo de Evel, Casal da Coelheira, ou S. Martinho (adega da Ravasqueira é também excelente), é algo que muitos mortais ainda não descobriram.

*Para lá da actividade científica, a que situações da vida é que gostaria de aplicar os seguintes verbos: medir, prever, correlacionar, simular e publicar.*

*Medir:* Gostaria de saber medir melhor o impacto de cada um dos professores/investigadores para o desenvolvimento do País. Os instrumentos que possuímos são pouco rigorosos e premeiam-se mais indicadores parciais e não globais. Devia medir a distância que existe entre nós e os governantes... e torná-la cada vez menor.

*Prever:* Gostaria de conseguir prever quando seremos bem governados, nomeadamente nas áreas da ciência, tecnologia e de desenvolvimento industrial, agrícola do mar. Nes-

ta previsão o modelo é simples e não necessita equação ou modelo complexo. Devem ser adicionados as variáveis bom senso, competência e confiança.

**Correlacionar:** Gostaria de saber correlacionar os comportamentos humanos com o maior ou menor grau de felicidade de cada indivíduo ou grupo de indivíduos. Gostaria ainda de conseguir correlacionar a inteligência com o respeito mútuo.

**Simular:** Imitar? Fazer crer? Ou disfarçar? Simular a boa disposição deste século, os desenvolvimentos futuros dos sistemas sociais e das pessoas, fazer crer que os Descobrimientos Portugueses continuam e imitar o rigor alemão nas horas de trabalho dos Portugueses!

**Publicar:** A minha autobiografia (assim não deixava dúvidas a ninguém...), um livro de Termodinâmica, as notas das minhas aulas para os estudantes em formato electrónico.

**Se a sua vida desse um filme, quem gostaria que o realizasse?**

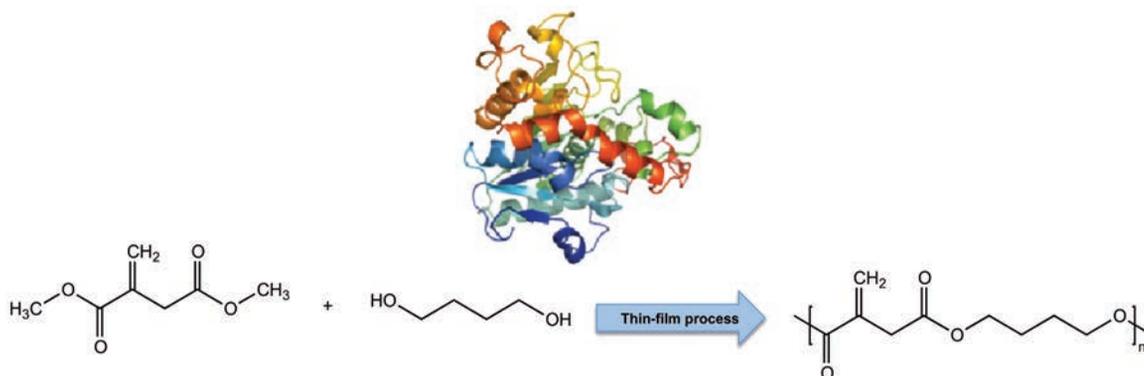
Robert Zemeckis (*Polar Express*, *Who Framed Roger the Rabbit*, *Forrest Gump*) ou Steven Spielberg (E.T., *Lista de Schindler*, *Jurassic Park*).

**Paulo Mendes**  
pjgm@uevora.pt

## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

### FILMES FINOS PARA BIOCATÁLISE

Uma abordagem não convencional na área da biocatálise permitiu que investigadores em Itália melhorassem a capacidade de reutilização de uma enzima numa mistura reaccional sem recurso a solventes. Com este estudo, os investigadores esperam contribuir para alargar as aplicações industriais deste tipo de catalisadores.



Lucia Gardossi, da Universidade de Trieste, tem investigado o uso de sistemas reaccionais sem recurso a solventes, numa perspectiva de química sustentável e também devido à importância que esta abordagem tem para a indústria. Apesar dos graus de eficiência e selectividade serem relevantes, as versões biocatalisadas de reacções químicas industriais raramente têm viabilidade económica. As misturas reaccionais requerem, geralmente, agitação muito vigorosa o que tem o inconveniente de danificar as enzimas e limitar a sua reutilização.

A abordagem proposta pela equipa de investigação passou pelo uso de um filme fino de enzimas imobilizadas de modo covalente em resinas, e testado numa reacção de poliesterificação catalisada por uma lipase, na ausência de solvente. Este sistema mostrou preservar a integridade da enzima, uma vez que não houve necessidade de agitação da mistura reaccional, e promoveu uma melhoria da capacidade de reutilização do biocatalisador.

Polona Znidarsic, investigadora na área da biotecnologia na Universidade de Ljubljana, na Eslovénia, elogia o estudo da equipa de investigadores italianos: “abordando vários parâmetros-chave, este estudo representa um passo importante para a produção industrial sustentável e económica de poliéster”.

(adaptado de “Thin film approach to biocatalysis”, <http://www.rsc.org/chemistrByworld/2015/01/biocatalysis-solvent-free-thin-film> e de Alessandro Pellis, Livia Corici, Loris Sinigoi, Nicola D’Amelio, Diana Fattor, Valerio Ferrario, Cynthia Eberta, Lucia Gardossi. *Green Chem.* (2015) DOI: 10.1039/C4GC02289K)

**Paulo Mendes**  
(pjgm@uevora.pt)

# QUÍMICA BIOINORGÂNICA E LUZ

## FOTOSSÍNTESE, OXIGÉNIO E ÁGUA

José J.G. Moura\*, Luísa B. Maia, Sofia R. Pauleta, Isabel Moura

UCIBIO, REQUIMTE, Departamento de Química,  
Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa  
jose.moura@fct.unl.pt  
<http://sites.fct.unl.pt/biologicalchemistryatfctunl>

Um comentário sucinto para celebrar o Ano Internacional da Luz (UNESCO) e a relevância de um nano-catalisador (agregado contendo manganês e cálcio) na oxidação da molécula de água pelo Fotossistema II - um tópico “quente” em Química Bioinorgânica.

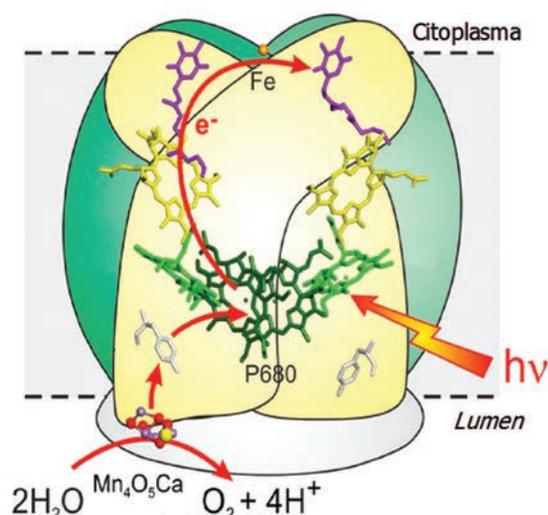
2015 foi declarado pela UNESCO como o **Ano Internacional da Luz** ([www.light2015.org](http://www.light2015.org)). Diversas manifestações vão ter lugar no Mundo, e em Portugal irão decorrer múltiplas iniciativas ([//ail2015.org](http://ail2015.org)). A fotossíntese será um tópico importante nestas comemorações.

A captação de luz por plantas verdes, algas e algumas bactérias é um dos processos mais importantes da vida, convertendo energia solar (luz) em energia armazenada na forma de ligações químicas (hidratos de carbono – biomassa). A transição duma atmosfera anóxica para óxica, em consequência da cisão da molécula de água e acumulação de oxigénio pelo efeito da luz, através do processo fotossintético, teve um impacto enorme na evolução das espécies e no aparecimento da maioria dos organismos que hoje compõem a biosfera terrestre [1].

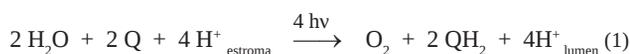
A conversão de energia luminosa em energia química é conseguida através da conjugação de dois sistemas complexos: Fotossistema I (FSI) e Fotossistema II (FSII). O FSII é responsável pela produção de poder oxidante para cindir a molécula de água, e o FSI origina o poder redutor utilizado para a produção de cofatores intermediários energéticos (NADPH) necessários para fixar CO<sub>2</sub> em hidratos de carbono.

FSII é um complexo proteico dimérico inserido na membrana dos tilacóides de organismos fotossintéticos. Cada monómero apresenta uma enorme complexidade e contém mais de 20 proteínas (algumas com vários grupos hémicos), lípidos, diversos cofatores (como clorofilas, carotenóides, xantofilas, feofitinas, plastoquinonas) e, para grande surpresa, um agregado contendo manganês (Mn) e cálcio (Ca), formulado como [Mn<sub>4</sub>O<sub>5</sub>Ca] (Figuras 1 e 2). O papel desempenhado por este centro tem sido descrito detalhadamente [2-4].

Designado como “Complexo de Oxidação da Água – COA” (“Water Oxidation Complex – WOC”), o agregado [Mn<sub>4</sub>O<sub>5</sub>Ca], rodeado por uma matriz proteica, é o centro reaccional de iniciação da reacção de cisão da molécula de água (Figura 2). A reacção global envolve quatro electrões (cedidos por duas moléculas de plastoquinona reduzida (Q), quatro prótons e quatro fotões (equação 1)).



**Figura 1** – Arranjo dos cofatores no complexo proteico dimérico envolvido na separação de carga, transporte de electrões e oxidação da água. Alguns componentes em destaque: Plastoquinonas (magenta), Clorofilas (verde), Feofitinas (amarelo) e Tirosinas (cinza). Está também destacada a localização do agregado [Mn<sub>4</sub>O<sub>5</sub>Ca]. Figura adaptada de [12] com permissão. Copyright 2013 American Chemical Society



### A ESTRUTURA DO AGREGADO COA - [Mn<sub>4</sub>O<sub>5</sub>Ca]

Devido à complexidade do problema, os estudos estruturais realizados por espectroscopia de absorção de raios-X de estrutura fina (EXAFS), difracção e cristalografia de raios-X, iniciaram-se em 2001, com continuidade até ao presente:

- 2001, Witt, Saenger, *et al.* [5]

Primeira estrutura tridimensional (resolução 0,38 nm) do FSII isolado da cianobactéria *Synechococcus elongatus*

- 2003, Kamiya e Shen [6]

Estrutura do FSII isolado de *Thermosynechococcus vulcanus* (resolução 0,37 nm)



- 2004, Barber e Iwata [7]

Primeira estrutura do FSII (resolução 0,35 nm) que inclui a presença de cálcio e manganês, num agregado

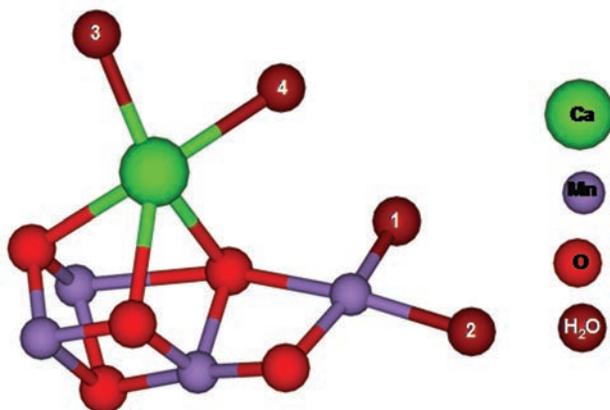
- 2011, Shen e Kamiya [8]

Estrutura do FSII (resolução 0,19 nm) que permitiu um avanço determinante na caracterização do agregado  $[Mn_4O_5Ca]$

- 2014, Shen, *et al.* [9]

Estrutura do FSII nativo (resolução 0,195 nm) resolvida com raios-X pulsados, para evitar degradação por exposição à radiação

O COA é descrito como um agregado, inserido na estrutura proteica, composto por quatro átomos de manganês, um átomo de cálcio e cinco átomos de oxigénio (Figura 2). Quatro átomos de oxigénio e três de manganês ocupam os cantos da estrutura cubana. Um átomo de manganês adicional encontra-se localizado fora da estrutura cubana e em contacto com dois dos outros átomos de manganês do agregado via átomos de oxigénio. Quatro moléculas de água são descritas na estrutura, de composição global  $[Mn_4O_5Ca(H_2O)_4]$ : duas destas estão envolvidas na coordenação ao cálcio e as outras duas a um dos átomos de manganês.

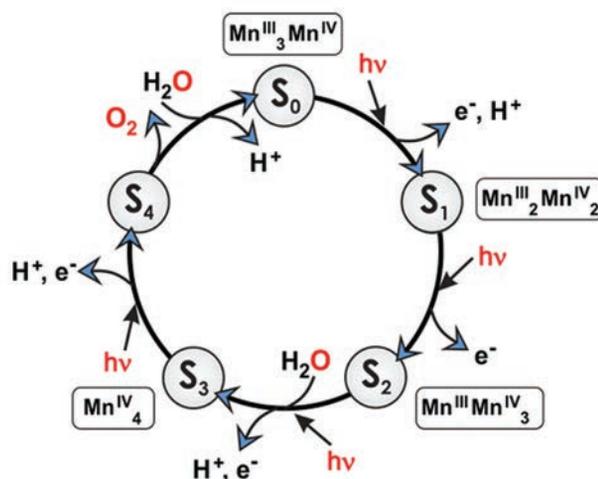


**Figura 2** – Estrutura do COA. O agregado  $Mn_4O_5Ca$  tem a conformação de uma cadeira distorcida, resultando numa estrutura cubana [12,13]. Não são mostrados os aminoácidos em interacção directa com o agregado. A imagem foi criada com o programa *Accelrys DS Visualizer* com base nas coordenadas PDB 4UB6

### MANGANÊS (E CÁLCIO) NA REACÇÃO DE CISÃO DA MOLÉCULA DE ÁGUA

Em Bioinorgânica, a relevância de um dado elemento depende da sua abundância (nem sempre aplicável), da sua (bio)disponibilidade e das propriedades apresentadas. O manganês é o terceiro elemento mais abundante no planeta Terra e apresenta uma química redox muito rica, sendo possível estabilizar vários estados de oxidação em solução aquosa, que podem ser relevantes em reacções biológicas [Mn(II, III e IV)]. Os estados de oxidação Mn(V) e Mn(VI) são oxidantes fortes. A coordenação de Mn(II) por ligandos adequados facilita a oxidação aos estados Mn(III) e Mn(IV) que são os blocos construtores do COA, organizando-se em compostos de valência mista polinucleares [10,11].

Na fotossíntese, o catalisador inorgânico  $[Mn_4O_5Ca]$ , embebido no FSII, catalisa a oxidação de  $H_2O$  a  $O_2$ . O agregado percorre uma série de reacções redox definidas num ciclo (designado por “Ciclo de Kok”) que envolve estados designados por  $S_n$  ( $n=0-4$ ), em que  $n$  designa o número de equivalentes oxidantes armazenados (Figura 3). O ciclo é controlado pelo complexo de pigmentos múltiplos (clorofilas e feofitinas, P680) e acoplado com o processo fotosintético. Um resíduo de tirosina (Figura 1, representado a cinza), com actividade redox, transfere electrões (um de cada vez) do COA, gerando poder oxidante no agregado, com conseqüente oxidação da molécula de água e libertação de oxigénio [12-15].



**Figura 3** – Ciclo catalítico proposto para o COA por Kok *et al.* [12-15]. A figura representa um dos ciclos propostos para os estados de oxidação dos átomos de manganês no agregado e os passos de transferência de prótons e electrões. Figura adaptada de [12] com permissão. Copyright 2013 American Chemical Society

### OUTROS ELEMENTOS RELEVANTES

Este comentário é focado no agregado  $[Mn_4O_5Ca]$ , único em Biologia, e nos estados de oxidação dos iões manganês. O ião cálcio é determinante como factor estrutural, nos processos de transferência electrónica do COA e na evolução/libertação do oxigénio. Os dados cristalográficos obtidos para o COA com uma resolução de 0,19 nm mostraram claramente que o ião cálcio tem sete ligandos, três  $\mu_3-O$  e duas moléculas de  $H_2O$ , além de mais dois carboxilatos de cadeias laterais de aminoácidos. Tem sido revelada uma certa flexibilidade no sítio de coordenação do cálcio. Surpreendentemente, a única substituição funcional para o cálcio é o estrôncio [16].

Um estudo preciso do mecanismo da oxidação da água (substrato) requer o conhecimento do posicionamento das moléculas de água na esfera de coordenação do agregado  $[Mn_4O_5Ca]$  (Figura 2). Duas moléculas de água estão coordenadas ao Mn (moléculas de água 1 e 2) e duas ao cálcio (moléculas de água 3 e 4), tendo sido proposto que uma destas moléculas seja o substrato para a oxidação da água. Foi também demonstrado que o ião cloreto, localizado na proximidade do agregado, está envolvido nas reacções de transferência do COA [16].

## CONCLUSÃO

Muitos dos problemas actuais que enfrentamos, tais como a poluição do ar e a escassez de combustíveis fósseis convencionais, podem encontrar respostas amigáveis e eficazes, procurando nos sistemas naturais as soluções que foram sendo optimizadas durante anos de evolução.

Uma definição detalhada da estrutura, propriedades e reactividade do COA no FSII pode ser uma fonte de inspiração para a síntese de compostos inorgânicos catalíticos biomiméticos. O sucesso a ser atingido nesta área de investigação pode permitir ultrapassar as dificuldades existentes para o desenvolvimento de sistemas de conversão de energia com base na luz solar. Os avanços obtidos recentemente poderão permitir desenhar sistemas modelo para a síntese de novos catalisadores-oxidantes artificiais, permitindo uma eficaz cisão da molécula de água, com base no conhecimento adquirido no COA. Uma comparação do catalisador biológico com nano-óxidos de manganês é uma avenida a explorar [17 e refs. indicadas].

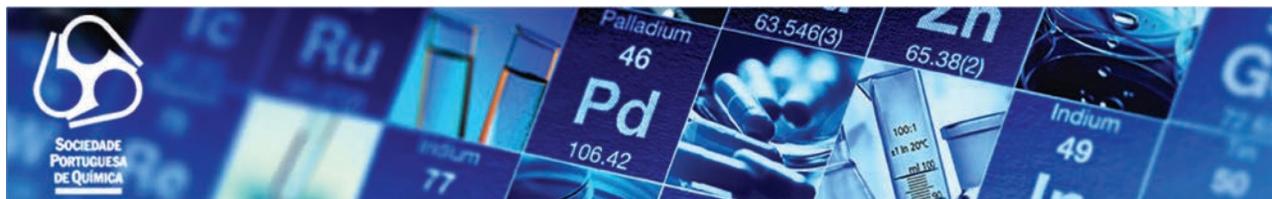
A Química Bioinorgânica é uma área científica recente e um “*non-sense name*”: por um lado orgânico, negado pelo *in*, que se neutraliza pela introdução do *bio*. Esta resulta do facto de se ter compreendido que a Química da Vida, tradicionalmente ligada à transformação de compostos de carbono envolvidos em processos vitais (tais como ácido cítrico, ácido láctico, ácido acético, etc, geralmente dos domínios da Química Orgânica) necessitava de elementos inorgânicos, em particular sódio, potássio, cálcio, magnésio, e muitos metais tais como manganês, ferro, cobalto, níquel e outros menos conhecidos, como o molibdénio, vanádio, etc (sem sermos exaustivos, os conhecidos “metais de transição” da tabela periódica) [18].

A estrutura-função de metais em proteínas (metaloenzimas) é um campo científico de enorme relevância, onde o impacto estrutural e funcional dos metais é incontornável para a compreensão da vida tal como a conhecemos, e como é bem exemplificado neste comentário.

## REFERÊNCIAS

[1] D.E. Canfield, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.* **33** (2005) 1-36

- [2] J.P. McEvoy, G.W. Brudvig, *Chem. Rev.* **106** (2006) 4455-4483
- [3] A. Amunts, H. Toporik, A. Borovikova, N. Nelson, *J. Biol. Chem.* **285** (2010) 3478-3486
- [4] E.M. Sproviero, J.A. Gascon, J.P. McEvoy, G.W. Brudvig, V.S. Batista, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 3428-3442
- [5] A. Zouni, H.-T. Witt, J. Kern, P. Fromme, N. Krauss, W. Saenger, P. Orth, *Nature* **409** (2001) 739-743
- [6] N. Kamiya, J.-R. Shen, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **100** (2003) 98-103
- [7] K.N. Ferreira, T.M. Iverson, K. Maghlaoui, J. Barber, S. Iwata, *Science* **303** (2004) 1831-1838
- [8] Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, *Nature* **473** (2011) 55-60
- [9] M. Suga, F. Akita, K. Hirata, G. Ueno, H. Murakami, Y. Nakajima, T. Shimizu, K. Yamashita, M. Yamamoto, H. Ago, J.-R. Shen, *Nature* (2014) doi: 10.1038/nature13991 (accedido a 13/02/2015)
- [10] N.N. Greenshaw and A. Earnshaw, *Chemistry of the Elements*, Reed Education and Professional Publishing, Oxford, 2001
- [11] F.A. Cotton and G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, 5<sup>th</sup> ed., Wiley-Interscience, New York, 1988
- [12] N. Cox, D.A. Pantazis, F. Neese, W. Lubitz, *Acc. Chem. Res.* **46** (2013) 1588-1596
- [13] M.M. Najafpour, M.Z. Ghobadi, B. Haghighi, J.J. Eaton-Rye, T. Tomo, J.-R. Shen, S.I. Allakhverdiev, *Biochemistry (Mosc)* **79** (2014) 324-336
- [14] N. Cox, M. Retegan, F. Neese, D.A. Pantazis, A. Boussac, W. Lubitz, *Science* **345** (2014) 804-808
- [15] B. Kok, B. Forbush, M. MacGloin, *Photochem. Photobiol.* **11** (1970) 457-475
- [16] F.H.M. Koua, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **110** (2013) 3889-3894
- [17] M.M. Najafpour, M.Z. Ghobadi, B. Haghighi, T. Tomo, J.-R. Shen, S.I. Allakhverdiev, *Biochim Biophys. Acta* **1847** (2015) 294-306
- [18] J.J.R. Fraústo da Silva, R.J. P. Williams, “The Biological Chemistry of the Elements: The Inorganic Chemistry of Life”, 2<sup>nd</sup> Edition, Oxford University Press, 2001



Torne-se Sócio da Sociedade Portuguesa de Química e beneficie de:

- Pertencer a uma comunidade científica dinâmica;
- Receber o boletim “QUÍMICA”;
- Descontos nos Encontros promovidos pela SPQ;
- Descontos nas publicações da SPQ;
- Protocolos assinados entre a SPQ e outras entidades;
- Participar na promoção da Química;
- Apoiar uma Sociedade Científica.

# Highly attractive 2015 Rates\*

## for members of ChemPubSoc Europe societies

\*[without local VAT]



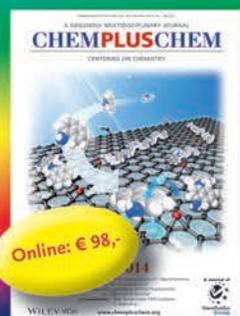
IF 2013: 5.696



IF 2013: 3.154



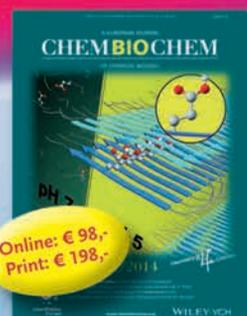
IF 2013: 2.965



IF 2013: 3.242



IF 2013: 2.938



IF 2013: 3.060



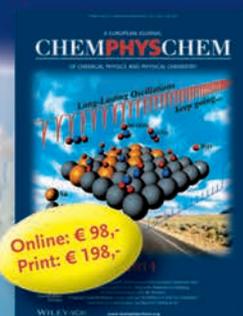
IF 2013: 3.046



IF 2013: 7.117



IF 2013: 5.044



IF 2013: 3.360

### Online ordering:

Simply visit the journal's homepage at

[www.onlinelibrary.wiley.com](http://www.onlinelibrary.wiley.com)

GET ACCESS  
Subscribe / Renew

Choose on the left-hand menu and complete your order.



NEW to the family

KNCV



GDCh

GESELLSCHAFT  
DEUTSCHER CHEMIKER



Société Chimique de France



SCS  
Swiss Chemical  
Society



GESELLSCHAFT  
ÖSTERREICHISCHER  
CHEMIKER



MChE



RSEQ  
Real Sociedad Española de Química  
El Sitio de la Química en España

[www.chempubsoc.eu](http://www.chempubsoc.eu)

PSF 14-06298-0-00-001

# MARCOS HISTÓRICOS EM CRISTALOGRAFIA

Maria João Romão\*, Teresa Santos-Silva, Isabel Bento, Filipe Freire, Marino F.A. Santos, Ana Luísa Carvalho

UCIBIO, REQUIMTE, Departamento de Química, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa  
maria.romao@fct.unl.pt

**Milestones in Crystallography** – *Crystallography has been recognized as one of the pillars of the scientific knowledge, namely for understanding the nature of the materials that surround us. Nowadays, Crystallography is applied in many different areas, from the design of new drugs to the development of new materials. UNESCO, considering its impact in humankind, declared 2014 the International Year of Crystallography. In this paper we describe the most relevant milestones in Crystallography, since the XVIII century until the present day, highlighting the great importance of Crystallography to our current knowledge in a wide range of areas, from Physics to Chemistry and Biology.*

A Cristalografia tem sido reconhecida como um dos pilares do conhecimento científico, permitindo compreender em detalhe a natureza dos materiais que nos rodeiam. Actualmente a sua aplicação estende-se a áreas muito diversas, desde o desenho de novos fármacos ao desenvolvimento de novos materiais. 2014 foi declarado pela UNESCO o Ano Internacional da Cristalografia tendo em conta o impacto que esta ciência tem na vida humana. Neste artigo é apresentada uma compilação de alguns marcos históricos relevantes em Cristalografia, desde o século XVIII até à actualidade, ilustrando a sua notável contribuição para o conhecimento actual em áreas muito diversas, desde a Física à Química e Biologia.

## INTRODUÇÃO

São inúmeras as contribuições da Cristalografia para o progresso em diferentes áreas científicas como a Física, a Química, a Biologia, a Medicina ou a Ciência dos Materiais. Com o objectivo de ilustrar a importância da Cristalografia ao longo do tempo, compilámos neste artigo alguns dos marcos históricos mais relevantes. Tendo por inspiração um suplemento, editado pelo grupo *Nature*, no âmbito das celebrações do Ano Internacional da Cristalografia (AICr2014), intitulado *Milestones in Crystallography* [1], seleccionámos dezassete grandes descobertas ou avanços que são descritas por ordem (quase) cronológica desde o nascimento da Cristalografia até ao seu impacto na compreensão de fenómenos na Química e na Biologia. Os exemplos escolhidos vão desde os minerais e a simples molécula do benzeno até complexos macromoleculares como os vírus ou o ribossoma.

### 1. A NATUREZA INTERNA DOS CRISTAIS

Em 1781, Rene-Just Haüy, um padre parisiense, ao observar um lindíssimo cristal prismático de calcite, deixou-o cair acidentalmente, o qual se desfez em vários pedaços. Ao observar os fragmentos do cristal verificou que as fracturas haviam ocorrido ao longo de planos bem definidos, posteriormente designados por planos cristalográficos. Baseado na observação da morfologia dos cristais (Figura 1), Haüy propôs a existência de seis formas cristalinas e concluiu que os cristais deveriam ser resultantes de uma repetição de unidades a que chamou “*molécules intégrantes*” (células unitárias) [2]. O contratempo da queda do cristal aliado ao apurado espírito de observação de Haüy ajudou à compreensão de uma característica fundamental dos materiais cristalinos: a periodicidade.



**Figura 1** – Cristal de calcite e fragmentos formados por clivagem romboédrica

No entanto, este conceito era demasiado simples para explicar todas as propriedades dos cristais e subsistiam duas questões importantes por esclarecer: Qual a lista completa de operações de simetria que podem ocorrer num cristal? Qual a natureza das “*molécules intégrantes*” ou células unitárias? Em relação à primeira questão era claro que apenas os eixos de simetria rotacional 2, 3, 4 e 6 seriam consistentes com as propostas de Haüy e em 1830 Johann Hessel concluiu que aquela restrição conduziria a 32 possíveis classes cristalinas (grupos pontuais) [3]. Em relação à segunda questão faltava acrescentar ao conceito de célula unitária, o de rede cristalina que descreve um cristal como uma rede de pontos discretos gerados por determinadas operações de translação. Em 1850, August Bravais considerou esta noção para derivar o sistema de classificação para 14 possíveis redes cristalinas, as redes de Bravais [4]. No entanto, estas 14 redes não conseguiam ainda explicar todas as 32 classes cristalinas, pois faltava combinar translações com operações de rotação e de reflexão. Apenas alguns anos mais tarde foi possível, por aplicação da Teoria de Grupos, chegar à definição completa de todas as combi-

nações possíveis de operações. Foram vários os cientistas envolvidos, tendo sido Arthur Schönflies quem, em 1891, publicou a lista completa dos 230 Grupos Espaciais [5]. Estes estão compilados nas Tabelas Internacionais de Cristalografia (Vol. A) e são uma referência para todos os cristalógrafos.

## 2. RÖNTGEN E A DESCOBERTA DOS RAIOS-X

Wilhelm Conrad Röntgen, Professor de Física na Universidade de Würzburg, descobriu no dia 8 de Novembro de 1895 “um novo tipo de radiação”, como resultado de uma observação casual. Ao realizar experiências com tubos de raios catódicos observou que uma superfície fluorescente distante se apresentava iluminada. Ao investigar o que se passava descobriu que o impacto dos raios catódicos num tubo em vácuo gerava uma nova espécie de radiação invisível que tornava o ecrã fluorescente mesmo quando no seu percurso os raios tinham que atravessar objectos opacos (cartão, madeira, cobre, etc). Além disso observou que os raios podiam ser registados em chapas fotográficas (Figura 2). Na medida que a natureza dessa radiação era então desconhecida, Röntgen decidiu chamar-lhe raios-X. Logo a 28 de Dezembro do mesmo ano os resultados foram aceites para publicação nos *Proceedings* da Sociedade de Física Médica de Würzburg [6].

A notícia das observações de Röntgen espalhou-se muito rapidamente para a época de então tendo tido uma repercussão gigantesca a nível mundial. Em 1901, Röntgen recebeu o primeiro Prémio Nobel da Física pelo “reconhecimento dos serviços extraordinários prestados com a descoberta dos raios posteriormente designados com o seu nome”. Passados alguns anos, Max von Laue demonstrava que os raios-X são, tal como a luz visível, radiação electromagnética, diferindo apenas no respectivo comprimento de onda.

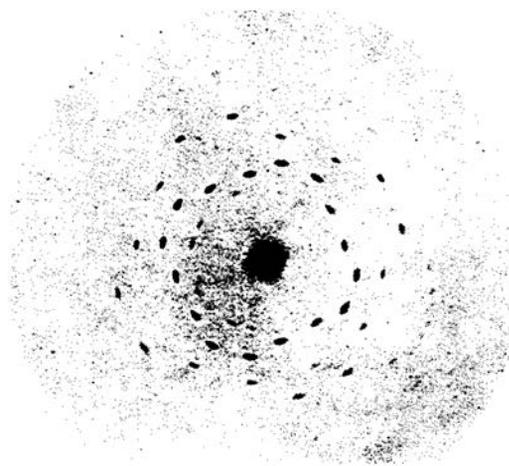


**Figura 2** – Imagem de uma das primeiras fotografias de raios-X obtidas por Röntgen da mão esquerda da sua mulher ([http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1901](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1901))

## 3. A EXPERIÊNCIA DE VON LAUE

Nos anos que se seguiram à descoberta dos raios-X foi estimado que o seu comprimento de onda seria da ordem de  $0,5\text{Å}$  [7,8] mas persistia o debate acerca da verdadeira natureza dos mesmos. Teriam uma natureza corpuscular ou ondulatória? Em 1912, Max von Laue, Walter Friedrich e Paul Knipping realizaram a experiência crucial ao sujeitarem vários tipos de cristais ( $\text{ZnS}$ ,  $\text{Cu}_2\text{SO}_4$ ) à incidência de um feixe de raios-X. Ao colocarem uma chapa fotográfica por detrás do cristal observaram um registo directo dos raios-X demonstrando assim pela primeira vez a difracção de raios-X por uma rede cristalina (Figura 3) [9]. Estes resultados e a respectiva interpretação por von Laue [10] tiveram uma repercussão enorme no meio científico pois os padrões de interferência observados vinham comprovar a interpretação de que os raios-X eram ondas de radiação electromagnética. Além disso tiveram um grande impacto na comunidade de cristalografia pois as manchas de difracção bem definidas demonstravam que, nos cristais, os átomos estariam organizados numa rede espacial.

Max von Laue resolvia assim, com uma única experiência, duas questões que eram debatidas na comunidade científica no início dos anos 1900. Por um lado a compreensão da natureza misteriosa dos raios-X e por outro a demonstração da teoria do arranjo interno dos cristais em termos de uma rede regular de átomos. Em 1914 von Laue foi distinguido com o Prémio Nobel da Física pela “sua descoberta da difracção dos raios-X por cristais”.



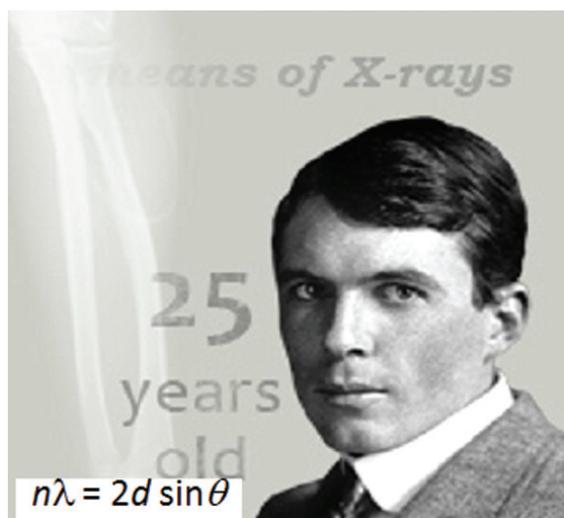
**Figura 3** – Padrão de difracção por um cristal de  $\text{ZnS}$  depois de exposto aos raios-X ([http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1914/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1914/))

## 4. A LEI DE BRAGG

Os resultados das experiências de Laue, Friedrich e Knipping [9] levaram à necessidade de uma teoria que interpretasse correctamente o fenómeno da difracção de raios-X. Segundo von Laue, sendo os raios-X radiação electromagnética com um comprimento de onda da ordem de grandeza das distâncias interatómicas, deveria haver um paralelismo com os padrões ópticos obtidos por incidência de luz visível numa rede de espaçamentos regulares [10].

Faltava contudo uma teoria que permitisse compreender as posições das reflexões assim como calcular as estruturas moleculares a partir dos padrões de difracção, o que veio a ser possível graças às descobertas de William Henry Bragg e do filho William Lawrence Bragg (Figura 4). Este último propôs um tratamento matemático em que a difracção resultaria da reflexão dos raios-X por planos paralelos sucessivos da rede cristalina. Segundo W.L. Bragg, os raios-X reflectidos por planos adjacentes, percorreriam diferentes distâncias tendo demonstrado que a difracção só ocorre quando a diferença da distância percorrida é igual a um múltiplo do comprimento de onda do feixe de raios-X [11,12]. Esta distância é, por sua vez, dependente do ângulo de incidência ( $\theta$ ) que se relaciona com o comprimento de onda  $\lambda$ , através da famosa lei de Bragg,  $n\lambda = 2d \sin\theta$ .

Para além do tratamento matemático foi também crucial o desenvolvimento do primeiro espectrómetro de raios-X [13] que permitiu a W.H. Bragg e W.L. Bragg detectarem os raios-X difractados a diferentes ângulos de incidência. Foi-lhes assim possível investigar cristais de diferentes composições e, recorrendo à lei de Bragg, resolver as primeiras estruturas cristalinas tais como as do cloreto de sódio ou do diamante [14-18]. Os métodos desenvolvidos por pai e filho para a análise das estruturas cristalinas levaram ao surgimento da cristalografia por raios-X e em 1915, W.H. Bragg e W.L. Bragg foram distinguidos com o Prémio Nobel da Física.



**Figura 4** – William Lawrence Bragg com 25 anos quando recebeu o prémio Nobel da Física em 1915, juntamente com o seu Pai. É o mais jovem laureado Nobel em Química de sempre ([http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1915/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1915/))

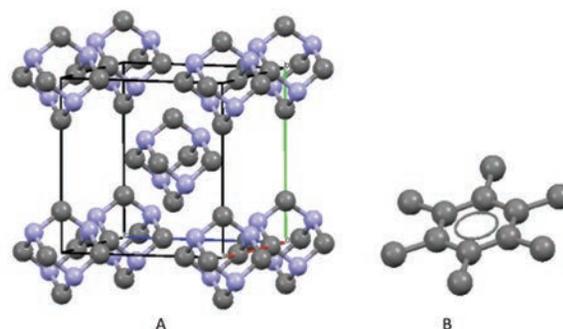
## 5. A ESTRUTURA DAS PRIMEIRAS MOLÉCULAS ORGÂNICAS

No início do século XX, os químicos debatiam-se com os problemas de análise estrutural de moléculas, sendo as respectivas estruturas propostas com base em dedução lógica suportada experimentalmente. A validação dessas estruturas era em geral obtida indirectamente por síntese química. A descoberta da cristalografia de raios-X veio assim permitir a determinação directa das estruturas moleculares revolucionando a Química Orgânica. Nos anos 1920 ainda era duvidoso que as moléculas orgânicas mantivessem a

sua identidade quando empacotadas num cristal. A primeira evidência de que tal era verdade surgiu em 1923 com a determinação da estrutura cristalina completa da hexametenotetraamina ( $C_6H_{12}N_4$ ), levada a cabo independentemente por grupos de Berlim [19] e do Caltech [20], que confirmou a fórmula química do composto (Figura 5A).

Outro marco extremamente importante que se seguiu foi o trabalho notável de Kathleen Lonsdale, discípula de W.H. Bragg, que conseguiu decifrar um dos maiores mistérios da química de então: a estrutura do anel de benzeno. Apesar da proposta de Kékule em 1865 de que a estrutura do benzeno deveria conter um anel de seis membros com ligações simples e duplas alternadas, subsistiam dúvidas acerca da sua conformação e detalhes estruturais. K. Lonsdale escolheu estudar o hexametilbenzeno na medida em que, contrariamente ao benzeno ou muitos dos seus derivados, era sólido à temperatura ambiente. Após um trabalho exaustivo e persistente, em 1928 Kathleen conseguia provar a estrutura plana e regular do anel hexagonal do benzeno [21-23] o que teve uma repercussão enorme no futuro do conhecimento e análise de todos os compostos aromáticos.

Com estes desenvolvimentos pioneiros, as estruturas cristalinas passavam a ser utilizadas para validar a síntese química em vez do oposto.



**Figura 5** – A) Empacotamento cristalino da hexametenotetraamina (átomos de N a azul e de C a cinzento) B) estrutura do hexametilbenzeno

## 6. A ESTRUTURA DOS MINERAIS

Até à descoberta da difracção de raios-X, a análise de minerais era efectuada essencialmente recorrendo ao microscópio de luz polarizada que permitia a respectiva caracterização morfológica (Figura 6). No entanto apenas com esta técnica não era possível obter informação acerca do arranjo estrutural dos átomos no interior dos cristais. A descoberta da difracção de raios-X por pós em 1916-1917 levou a um aumento significativo do número de estruturas de minerais determinadas.

Quando W.H. Bragg e R.E. Gibbs iniciaram o estudo do quartzo, já várias estruturas mais simples haviam sido elucidadas. A descoberta das estruturas do quartzo- $\alpha$  e  $\beta$  em 1925 marcou o início de um extenso trabalho sobre silicatos, com a maioria das contribuições nesta área provenientes de discípulos de Bragg [24]. Com o aumento do número de estruturas cristalinas determinadas, tornou-se

necessário racionalizar princípios teóricos que permitissem a interpretação dos dados obtidos. Em 1926, Victor Goldschmidt postulou algumas regras sobre a substituição de átomos em estruturas cristalinas [25], que serviram de inspiração a Linus Pauling, que veio a formular um conjunto de regras que foram pela primeira vez colocadas em prática no estudo de zeólitos [26]. Em 1930, e com toda a informação disponível até aquela altura, W.L. Bragg estabeleceu então a primeira classificação compreensiva dos silicatos [27]. Os estudos dos mineralogistas passaram também a focar-se nas imperfeições e defeitos dos cristais, uma vez que estas microestruturas podem estar relacionadas com a génese dos cristais de minerais, fornecendo assim informação sobre o ambiente em que esta ocorreu.

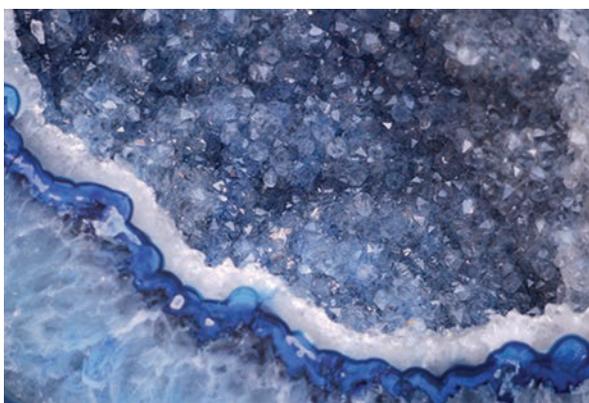


Figura 6 – Cristais de quartzo (cortesia de Patrícia Blázquez)

## 7. CONFIGURAÇÃO ABSOLUTA DO ÁCIDO TARTÁRICO

No final do século XIX os químicos começaram a preocupar-se em representar a organização espacial de moléculas com centros quirais e a distinguir estereoisómeros. Uma das observações da altura é que pares de moléculas com ligações atómicas idênticas podiam rodar o plano da luz polarizada em direcções opostas, designando-se por enantiómeros. A década de 1880 fora marcada pela extensa contribuição de Emil Fischer na síntese e conhecimento dos hidratos de carbono, o que lhe valeu o Prémio Nobel da Química em 1902. E. Fischer havia sugerido um modo de representar estereoisómeros, desenhando-os como uma projecção bidimensional - projecção de Fischer. Este modo de representação foi usado para representar a estereoquímica de açúcares, aminoácidos e outras moléculas orgânicas. De uma forma totalmente aleatória, Fischer classificou o enantiómero D da glucose como o isómero + (que desvia o plano de luz polarizada no sentido horário) e o isómero L como - (que promove um desvio no sentido anti-horário). Martin Rosanoff prosseguiu com esta classificação tendo analisado outras moléculas quirais como o gliceraldeído [28].

Contudo, apenas em 1951, foi possível confirmar a classificação de Fischer graças aos trabalhos de cristalografia por raios-X realizados por Bijvoet e colaboradores. Nas suas experiências, Bijvoet usou uma fonte de radiação de zircónio e um sal de sódio e rubídio da forma natural (+) do ácido tartárico. A possibilidade de excitar apenas os átomos de rubídio graças ao comprimento de onda da radiação es-

colhida (método da dispersão anómala), permitiu determinar a configuração absoluta de todos os átomos do cristal [29]. Ficava assim confirmado que a forma natural (+) do ácido tartárico correspondia efectivamente à configuração L proposta previamente por Fischer.

A dispersão anómala estabeleceu-se, assim, como uma ferramenta capaz de confirmar a estereoquímica absoluta de novas moléculas, corroborando simultaneamente os modelos quirais anteriormente propostos na literatura.

## 8. A ESTRUTURA DO FERROCENO

Em 1951, sem o terem como objectivo, Peter Pauson e Tom Kealy sintetizaram inadvertidamente um composto altamente estável, de fórmula  $C_{10}H_{10}Fe$ , [30] quando tentavam produzir o fulvaleno, um hidrocarboneto pouco usual constituído por 2 anéis de ciclopentadieno unidos por uma ligação C=C. A estrutura daquele composto inesperado era difícil de atribuir, nomeadamente no respeitante à ligação dos anéis de cinco membros ao átomo de ferro. Os autores propuseram então uma estrutura linear em que os dois anéis se ligavam ao átomo de Fe por ligações simples, o que fora também proposto, quase em simultâneo, por Miller, Tebboth e Tremaine [31].

Pouco depois, a proposta do carácter linear da estrutura foi posta em causa por Robert Woodward e Geoffrey Wilkinson que, baseando-se em informação indirecta, em particular de espectroscopia de infra-vermelhos, avançaram com um modelo em *sandwich* com o átomo de Fe entre os dois anéis [32]. Ainda em 1952, a estrutura em *sandwich* foi confirmada por Ernst Fischer e Wolfgang Pfab usando cristalografia por raios-X. Na estrutura cristalina, o átomo de Fe ocupa o centro dum anti-prisma pentagonal definido pelos 2 anéis paralelos de ciclopentadienilo [33] (Figura 7).

O composto foi designado por ferroceno e veio refundar a química organometálica levando ao posterior aparecimento de outros compostos em *sandwich* com outros metais e diferentes sistemas aromáticos. A importância desta descoberta levou à atribuição do Prémio Nobel da Química em 1973 a E.O. Fischer e G. Wilkinson.

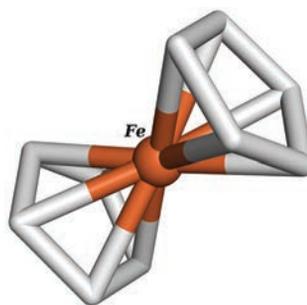


Figura 7 – Estrutura do ferroceno

## 9. ESTRUTURA SECUNDÁRIA DE PROTEÍNAS E A ESTRUTURA DO DNA

Até meados do século XX, a estrutura das proteínas continuava envolta em mistério apesar de, em 1936, Alfred Mirsky e Linus Pauling terem destacado a enorme impor-

tância das ligações por pontes de hidrogénio na definição da estrutura das proteínas. Nos 15 anos seguintes, Pauling e colaboradores focaram-se no estudo sistemático das ligações de hidrogénio em cadeias polipeptídicas, inspirados em trabalhos anteriores de William Astbury e recorrendo a estruturas cristalinas de aminoácidos e de pequenos péptidos. Em 1951, Pauling e Corey reportaram pela primeira vez a existência de elementos estruturais em proteínas: hélices- $\alpha$  e folhas- $\beta$  [34,35].

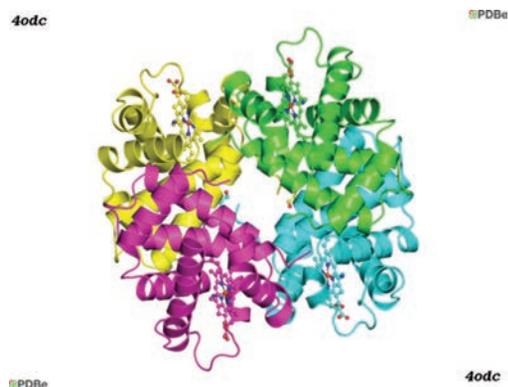
Os trabalhos de Linus Pauling tiveram um enorme impacto na química estrutural, e em 1954 este recebeu o Prémio Nobel da Química pela sua “investigação acerca da natureza da ligação química e na elucidação da estrutura de substâncias complexas”.

Em relação ao DNA, identificado como uma macromolécula nos anos 30, existiram várias hipóteses para a sua estrutura (nomeadamente o modelo de hélice tripla de Pauling). Em 1950, James Watson e Francis Crick, com o auxílio de Jerry Donohue, tentavam interpretar os resultados de Chargaff que previa a existência dos pares de bases A-T e G-C. Em paralelo, Maurice Wilkins seguido de Rosalind Franklin haviam iniciado a análise por cristalografia de fibras de DNA. Watson e Crick acederam aos padrões de difracção de fibras obtidos por Rosalind Franklin sem o seu consentimento (como é do conhecimento geral), cuja informação, quando combinada com os dados que já possuíam, lhes permitiu progredir e avançar com o famoso modelo da dupla hélice – “demasiado belo para não ser verdade” [36]. Em 1962, Crick, Watson e Wilkins receberam o Prémio Nobel da Fisiologia ou Medicina pela descoberta pioneira da estrutura do DNA, que teve um enorme impacto no desenvolvimento da Biologia Molecular.

## 10. AS PRIMEIRAS ESTRUTURAS DE PROTEÍNAS

Foi em 1937 que Max Perutz e os seus colaboradores foram confrontados com o “problema da fase” em cristalografia. Tinham conseguido obter cristais de hemoglobina que difractavam os raios-X e obtido um padrão de difracção mas, para resolver a estrutura tridimensional desta proteína que transporta o oxigénio nos glóbulos vermelhos, tinham que conhecer os ângulos de fases das ondas difractadas. Foi numa publicação em 1954 que David Green, Vernon Ingram e Max Perutz descreveram como tinham resolvido o “problema da fase” [37]. Este grupo de cientistas usou pela primeira vez o método de substituição isomórfica, que consiste em introduzir átomos “pesados” (neste caso, mercúrio) no cristal de hemoglobina, utilizando para o efeito compostos de mercúrio que iriam formar complexos com os átomos de enxofre livres na proteína [38]. Nesse artigo os autores mostravam como este método podia ser utilizado para a determinação directa de uma estrutura proteica. Foi apenas seis anos mais tarde, depois de muito trabalho a analisar milhares de reflexões e a construir quatro cadeias polipeptídicas que a estrutura da hemoglobina foi publicada a 5,5 Å de resolução [38]. Curiosamente, verificou-se que cada uma destas cadeias era semelhante à estrutura preliminar da proteína que liga o oxigénio nos músculos,

a mioglobina, reportada por John Kendrew em 1958 a 6 Å de resolução. Neste caso, o “problema da fase” fora também resolvido a partir de derivados isomórficos contendo mercúrio e ouro. Em 1960, John Kendrew e os seus colaboradores determinaram finalmente a estrutura da mioglobina de cachalote, a uma resolução de 2,0 Å [39] (Figura 8). Neste caso, como a estrutura apresentava uma alta-resolução já foi possível visualizar interacções atómicas, incluindo as hélices  $\alpha$  direitas (*right handed*) e a posição do grupo hemo na estrutura. Os avanços derivados deste trabalho tiveram um enorme impacto e reconhecimento na comunidade científica, e em 1962 o Prémio Nobel da Química foi atribuído a Max Perutz e John Kendrew.



**Figura 8** – Estrutura tridimensional da hemoglobina (imagem preparada com o programa Chimera e coordenadas PDB 4odc)

## 11. DIFRACÇÃO DE NEUTRÕES

Quando a radiação de neutrões foi descoberta por volta dos anos 1930, já a difracção de raios-X era usada para revelar a estrutura interna dos cristais. Pensou-se então que a radiação de neutrões poderia ser utilizada para o mesmo fim, pois os neutrões livres teriam um comprimento de onda comparável às distâncias interatómicas num cristal. No entanto, à data, as fontes de neutrões eram muito fracas para constituírem uma ferramenta útil, e foi durante a Segunda Guerra Mundial que o maior avanço ocorreu, quando se concluíram os primeiros reactores nucleares. Após a guerra, vários cientistas procuraram fazer o melhor uso possível das instalações recentemente disponíveis: entre estes destacam-se Ernst Wollan e Clifford Shull que desenvolveram os princípios de difracção de neutrões. Em 1949, na *Physical Review*, é publicado por Shull e James Smart, um artigo de uma página, reportando a ocorrência de apenas alguns picos de dispersão de neutrões para o óxido de manganês [40]. Este artigo não fez mais do que confirmar uma hipótese fundamental do magnetismo colocada por Louis Néel, em 1921, que sugeria que alguns materiais podem ser magneticamente ordenados, sem serem magnéticos. Nestes anti-ferromagnetos, os momentos magnéticos elementares, ou *spins*, teriam orientações alternadas e cancelavam-se mutuamente. Os neutrões possuem um *spin*, funcionando eles próprios como pequenos magnetos. O que Smart sugeriu foi que a difracção de neutrões poderia permitir detectar directamente o antiferromagnetismo. Smart estava certo e assim se iniciou uma nova área, a da cristalografia magnética, com uma importância única para a difracção de neutrões. Na década de 1940, as fontes de neutrões disponíveis

limitavam-se aos reactores nucleares o que atrasava o seu progresso. No entanto, com a introdução de novos projectos de colaboração, onde a comunidade científica poderia ter acesso a grandes infraestruturas, esta limitação deixou de existir. Hoje em dia, existem no mundo várias infraestruturas com reactores nucleares, e a difracção de neutrões tornou-se uma ferramenta essencial em áreas tão diversas como a optimização de novos materiais para armazenamento de energia [41] ou na determinação da estrutura de vírus e de proteínas. Em ciência fundamental, a dispersão de neutrões continua a ser de enorme importância, como uma sonda de formas pouco comuns de magnetismo.

## 12. AS GRANDES FONTES DE RADIAÇÃO

O aparecimento de laboratórios para a produção e utilização de radiação de sincrotrão (vulgarmente designados por Sincrotrões) foi determinante para muitos avanços científicos, muito particularmente para a análise estrutural por Cristalografia. Um Sincrotrão produz radiação electromagnética a partir da aceleração radial de partículas carregadas, com recurso a grandes magnetos. O custo de construção é muito elevado e normalmente suportado pelas entidades financiadoras de países desenvolvidos. A utilização da infra-estrutura é disponibilizada a cientistas de várias áreas, sob a forma de diferentes linhas especializadas (*beamlines*). O primeiro sincrotrão de electrões foi projectado em 1945 por Edwin McMillan [42,43], embora o princípio do funcionamento tenha sido publicado, num jornal soviético em 1944, por Vladimir Veksler [44]. Dois dos mais antigos grandes Sincrotrões, já desactivados, foram o Bevatron, construído no *Lawrence Berkeley Laboratory* (Califórnia, EUA), e o Cosmotron, construído no *Brookhaven National Laboratory* (Nova Iorque, EUA). Exemplos de fontes de radiação de sincrotrão modernas são o *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) (Figura 9) e o *Soleil*, ambos em França, o *Diamond Light Source*, no Reino Unido, o *Swiss Light Source* na Suíça, o *Advanced Photon Source* (APS) em Chicago, nos EUA, e o *SPring-8* no Japão. Os mais modernos aceleradores de partículas, como o LHC (*Large Hadron Collider*) no CERN construído em 2008 na Suíça e com 27 km de diâmetro, baseiam-se no funcionamento dos sincrotrões. Portugal é membro associado do ESRF desde 1998 e membro do CERN desde 1986. Novas infraestruturas com potencial impacto para a biologia estrutural estão em desen-



**Figura 9** – O edifício das *beamlines* e do anel de armazenamento da infraestrutura de radiação de sincrotrão ESRF (imagem cortesia de P.Ginter/ESRF)

volvimento como o XFEL (do inglês *X-ray free-electron laser*), que permite determinar diferentes tipos de estruturas, tal como células e vírus, e tornou mais real a possibilidade de obter filmes de processos moleculares. Adivinha-se um futuro muito promissor para a Ciência dos XFEL.

## 13. BASES DE DADOS CRISTALOGRAFICOS

O *Protein Data Bank* (PDB) foi criado em 1971, na sequência de uma conferência realizada em Cold Spring Harbor, intitulada *Structure and Function of Proteins at the Three Dimensional Level*. Nessa conferência os cristalógrafos de macromoléculas debateram a preocupação acerca da criação de um repositório para dados cristalográficos de proteínas, que fosse acessível a todos. Pouco tempo depois foi publicado na *Nature New Biology* a criação oficial do repositório de dados cristalográficos de proteínas (PDB), coordenado pelo *Brookhaven National Laboratory* (EUA) e pelo Centro de Dados Cristalográficos (moléculas pequenas) em Cambridge (Reino Unido) [45]. A criação deste repositório constitui um marco histórico, pois naquele tempo a partilha da informação estrutural entre a comunidade científica era muito difícil e o *software* disponível ainda muito escasso. Com a criação do PDB, surgia a necessidade de criar programas interactivos que permitissem visualizar as estruturas 3D, assim como programas que permitissem armazenar e procurar estruturas no PDB [46-48]. Seguindo a tradição que existia na comunidade de cristalógrafos em partilhar *software* é em 1979 criado o *Collaborative Computational Project Number 4* (CCP4), por um grupo de cientistas no Reino Unido. Este projeto teve como objectivo desenvolver *software*, e outro tipo de ferramentas computacionais, para processar e analisar dados cristalográficos. Hoje em dia o CCP4 reúne um conjunto de programas que é usado por toda a comunidade de cristalógrafos [49].

Durante os anos oitenta, para além de se ter verificado um grande desenvolvimento das metodologias usadas para resolver estruturas 3D, houve também um enorme avanço nas tecnologias computacionais, o que levou a um aumento exponencial do número de estruturas depositadas no PDB que em 2014 ultrapassou as 100.000 (Figura 10). A maioria das revistas científicas exige a deposição dos modelos estruturais das proteínas, e dos dados experimentais asso-

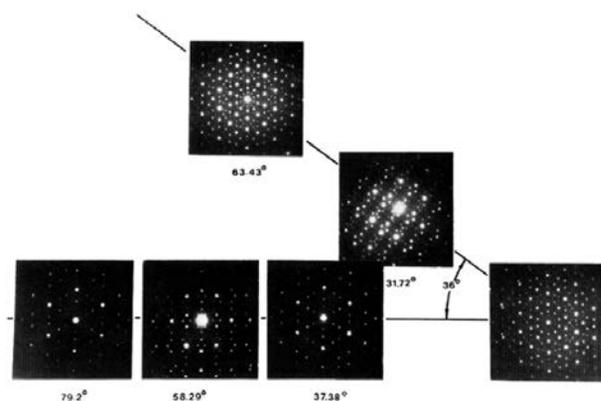


**Figura 10** – Selo comemorativo da deposição de 100000 estruturas no PDB, emitido durante a comemoração do Ano Internacional da Cristalografia 2014

ciados como pré-requisito para a publicação do manuscrito. O PDB é distribuído a partir de vários locais, em três continentes: o *Research Collaboratory of Structural Bioinformatics* (RCSB PDB) nos EUA, o *Protein Data Bank* na Europa (PDBe) do EMBL-EBI's e o PDB Japan (PDBj). Tendo começado apenas com sete estruturas nos anos 1970, o PDB tem hoje mais de 106.000 estruturas depositadas, das quais mais de 87.000 determinadas por Cristalografia por Raios-X, com acesso sem restrições a toda a comunidade científica.

#### 14. A DESCOBERTA DOS QUASICRISTAIS

Em 1984 Dan Shechtman pôs a comunidade de cristalógrafos em sobressalto, quando publicou um trabalho que questionava a definição, até à data perfeitamente estabelecida, de que um cristal era um arranjo periódico de células unitárias. Nesse trabalho [50], Shechtman apresentava as suas observações experimentais acerca de uma liga de alumínio que tinha sido rapidamente arrefecida para evitar a cristalização do material. Usando difracção de electrões verificou que uma região muito pequena do sólido produzia um padrão de difracção muito bem definido, e que sugeria a presença de simetria rotacional de grau 10 e simetria translacional não-periódica (Figura 11). Num cristal convencional, apenas é possível encontrar simetria de grau 2, 3, 4 e 6, com células unitárias que preenchem completamente o espaço disponível e num arranjo periódico. Assim sendo, esta liga de alumínio não poderia ser um cristal, mas difractava como tal. No final de 1984, e inspirados nos padrões de mosaicos de Penrose, os físicos Dov Levine e Paul Steinhardt [51] (e mais tarde o cristalógrafo Alan Mackay [52]) sugeriram uma explicação: teoricamente, a aperiodicidade seria possível em três dimensões, e um padrão de difracção simulado de um mosaico de Penrose exibiria simetria de grau 5. Designaram estas estruturas por quasicristais. A evidência experimental em materiais diversos (incluindo minerais naturais) rapidamente conquistou adeptos da teoria da quasi-periodicidade. Em 1992, a União Internacional de Cristalografia alterou a sua definição de um cristal para “qualquer sólido que produza um padrão de difracção essencialmente discreto”, o que constituiu o reconhecimento formal da existência de quasicristais. A confiança de Shechtman nas suas observações, questionando o que outros

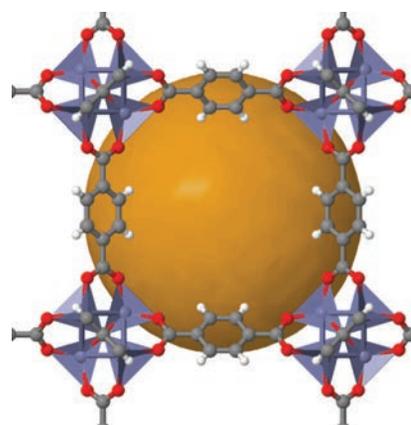


**Figura 11** – Imagens originais de difracção por electrões tiradas por Dan Shechtman. As relações angulares entre as várias zonas examinadas por Shechtman revelam que a amostra possui simetria icosaédrica (imagem cortesia de <http://www.nobelprize.org>)

consideravam estabelecido, fê-lo merecedor do Prémio Nobel da Química em 2011.

#### 15. CRISTAIS ARTIFICIAIS POROSOS (METAL ORGANIC FRAMEWORKS, MOFs)

Durante grande parte do século XX, a síntese de sólidos cristalinos resultava muitas vezes de uma feliz combinação de eventos. A conjugação de conhecimentos de química e cristalografia conduziu a um aumento do número de compostos cristalinos especialmente concebidos com estruturas e propriedades pré-determinadas. Na vanguarda da síntese destes materiais estiveram os cristais porosos, estruturas que contêm nanoporos, nos quais se podem ligar moléculas e/ou iões com diferentes tamanhos e formas. Estes cristais sintéticos encontram análogos na natureza, sob a forma de aluminossilicatos (zeólitos). Os primeiros relatos da síntese de zeólitos em laboratório datam da década de 1860, mas foi o trabalho de Richard Barrer na década de 1940 que iniciou uma era de grande produção de zeólitos sintéticos. Em 1948, Barrer reportou a síntese de um zeólito sintético análogo à mordenite, que foi caracterizado por difracção de raios-X por póis [53]. Mais tarde, graças ao trabalho de Robert Milton e Donald Breck foi possível a comercialização dos primeiros zeólitos sintéticos. Os zeólitos são materiais inteiramente inorgânicos cuja constituição final é difícil de controlar devido à sua composição química. Assim, os cientistas passaram a utilizar uma combinação de componentes orgânicos e inorgânicos para a síntese de cristais porosos, o que levou a um aumento do interesse nos cristais designados por *metal-organic frameworks* (MOFs), a partir dos finais do século XX [54-56] (Figura 12). Até aos dias de hoje, dezenas de milhares de estruturas MOF com diferentes propriedades foram sintetizadas, tendo aplicabilidade em processos de catálise, na distribuição de fármacos, no armazenamento de hidrogénio, ou na adsorção reversível de dióxido de carbono.

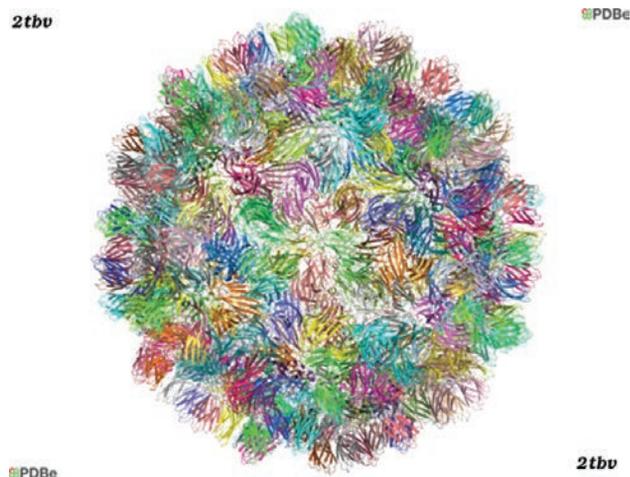


**Figura 12** – MOF-5 e respectiva célula unitária que forma uma cavidade representada pela esfera a laranja

#### 16. ESTRUTURAS DE VÍRUS E A SIMETRIA MOLECULAR

Um dos marcos que mais comprovou a importância da cristalografia na investigação biomédica foi a caracterização estrutural de partículas virais, com toda a informação que veio a fornecer acerca da interacção vírus-célula hos-

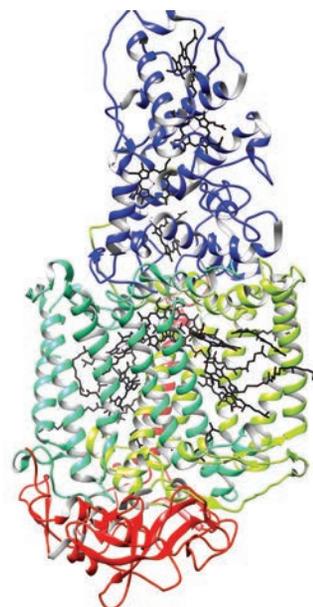
pedreira, assim como da relevância do arranjo simétrico de módulos proteicos para os mecanismos de entrada de um vírus numa célula. As primeiras estruturas cristalinas de vírus de RNA de plantas revelaram a simetria inerente das cápsides virais. O vírus do tomateiro (TBSV, *tomato bushy stunt virus*) é constituído por uma cadeia simples de RNA encapsulada numa cápside icosaédrica com um revestimento de 180 subunidades proteicas. Em 1978, Harrison *et al.* revelaram a primeira imagem de alta resolução de como as proteínas idênticas do revestimento se organizam em combinações de pentâmeros e hexâmeros para produzirem um vírus esférico [57] (Figura 13). Dois anos mais tarde, Abad-Zapatero *et al.* resolveram a estrutura cristalina da cápside do vírus do mosaico do feijão (SBMV, *southern bean mosaic virus*), revelando o mesmo arranjo das subunidades proteicas [58]. Em 1981, Wilson *et al.* revelaram a primeira imagem de um antígeno de superfície de um vírus patogénico [59]. Além de um invólucro membranar lipídico (adquirido quando emerge da superfície da célula hospedeira), o vírus da gripe humana possui duas glicoproteínas, a hemaglutinina e a neuraminidase. A hemaglutinina organiza-se em homotrímeros que se ligam aos receptores de superfície da célula hospedeira, participando activamente na fusão membranar entre o vírus e a célula.



**Figura 13** – Representação do revestimento proteico (180 cópias) da cápside do vírus do tomateiro TBSV (*tomato bushy stunt virus*) (figura obtida em <http://www.ebi.ac.uk/pdbe-srv/view/entry/2tbv>)

## 17. OS GRANDES DESAFIOS DA BIOLOGIA ESTRUTURAL MODERNA

Com menos de 600 estruturas únicas depositadas no PDB, as proteínas integradas nas membranas biológicas (20-30% do genoma humano) são consideradas o grande desafio actual da resolução de estruturas por cristalografia, sendo que a grande dificuldade reside na obtenção de cristais destas proteínas. Em 1985, Michel *et al.* revelaram a primeira estrutura de alta resolução de uma proteína integral de membrana, o Centro Reaccional Fotossintético, observando a interacção da superfície hidrofóbica das proteínas com os lípidos da bicamada fosfolipídica [60] (Figura 14). Mais tarde, Schulz *et al.* revelaram a primeira estrutura de uma porina, explicando como ocorre a difusão passiva através das membranas biológicas [61]. Também importante, foi a



**Figura 14** – Centro Reaccional Fotossintético de *Rhodospseudomonas viridis* (imagem preparada com o programa Chimera e coordenadas PDB 1prc)

resolução da estrutura da  $F_1$ -ATPase [62], uma verdadeira máquina onde o fluxo de prótons induz a rotação do domínio  $F_1$  e a consequente produção de adenosina trifosfato. O desenvolvimento da técnica de cristalização em fases cúbicas lipídicas (LCP, *lipidic cubic phase*) foi crucial para a obtenção de estruturas importantes como a bacteriorodopsina [63] e os receptores associados à proteína G (GPCRs, *G protein-coupled receptors*) [64].

Outro grande desafio que merece ser referido é a caracterização estrutural de complexos entre proteínas e ácidos nucleicos, com todo o potencial de informação que pode providenciar sobre importantes fenómenos como a tradução e a transcrição genéticas. Em 1979, Alex Rich determinou a primeira estrutura cristalina da forma Z do DNA [65], mas antes, em 1973, havia publicado a primeira estrutura de um RNA de transferência [66]. A resolução da estrutura do primeiro complexo proteína-ácido nucleico deu-se em 1984 com a estrutura do nucleossoma com 206 kDa [67]. A dimensão megaDalton foi atingida em 2001 com a estrutura completa do ribossoma 70S de *Thermus thermophilus*, incluindo tRNAs nos locais A, P e E e um mRNA, elucidando o mecanismo de tradução genética [68]. Para a compreensão do fenómeno da transcrição, foram cruciais as estruturas da Polimerase II do RNA de *Saccharomyces cerevisiae* isolada [69], e também em complexo com um fragmento de DNA [70].

A enorme importância destes resultados para o avanço do conhecimento é reflectida no número de Prémios Nobel, todos eles envolvendo a cristalografia de raios-X: Nobel da Química 1988 a H. Michel, J. Deisenhofer e R. Huber (Centro Reaccional Fotossintético); Nobel da Química 1997 a P. Boyer e J. Walker e J. Skou (Síntese de ATP e ATPases); Nobel da Química 2009 a V. Ramakrishnan, T. Steitz e A. Yonath (Ribossoma); Nobel da Química 2012 a R. Lefkowitz e B. Kobilka (GPCRs).

## AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Hugo Correia a assistência na preparação das Figuras 5 e 12 e ao João Pedro Veiga (CENIMAT, FCT-UNL) e Carlos C. Romão (ITQB-UNL) a revisão de partes deste artigo. À FCT-MEC o financiamento dos projectos: RECI/BBB-BEP/0124/2012; PTDC/QUI-BIQ/117799/2010; PTDC/BIA-PRO/118377/2010 e a bolsa SFRH/BD/77894/2011 a MFAS.

## REFERÊNCIAS

- [1] “Milestones in Crystallography” *Nature* (2014) doi: 10.1038/nature13348
- [2] R.J. Haüy, “*Essai d’une Théorie sur la Structure des Crystaux*”, Gougué et Née de La Rochelle, 1784
- [3] J.F.C. Hessel, “*Kristallometrie oder Kristallonomie und Kristallographie*”, E. B. Schwickert, 1830
- [4] A. Bravais, *J. l’Ecole Polytechnique* **19** (1850) 1
- [5] A. Schönflies, “*Kristallsysteme und Kristallstruktur*”, B. G. Teubner, 1891
- [6] W.C. Röntgen, *Sitzungsber. Der Würzburger Physik-Medic. Gesellsch.* **137** (1895) 132-141
- [7] W. Wien, *Nachrichten Kgl. Gesell. Wiss. Göttingen* **5** (1907) 598-601
- [8] J. Stark, *Nature* **77** (1908) 320
- [9] W. Friedrich, P. Knipping, M. Laue, *Sitzungsberichte der Kgl. Bayer. Akad. der Wiss.* (1912) 303-322
- [10] M. von Laue, *Sitzungsberichte der Kgl. Bayer. Akad. Der Wiss.* (1912) 363-373
- [11] W.L. Bragg, *Nature* **90** (1912) 410
- [12] W.L. Bragg, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **17** (1913) 43-57
- [13] W.H. Bragg, W.L. Bragg, *Nature* **94** (1914) 199-200
- [14] W.L. Bragg, *Proc. Royal. Soc. Lond. A* **89** (1913) 248-77
- [15] W.H. Bragg, *Nature* **90** (1912) 219; W.H. Bragg, *Nature* **90** (1912) 360-361
- [16] W.H. Bragg, W.L. Bragg, *Nature* **91** (1913) 557
- [17] A.H. Compton, *Nature* **95** (1915) 343-344
- [18] P.P. Ewald, *Nature* **195** (1962) 320-325
- [19] H.W. Gonell, H. Mark, *Z. Phys. Chem.* **107** (1923) 181-218
- [20] R.G. Dickinson, A.L. Raymond, *J. Am. Chem. Soc.* **45** (1923) 22-29
- [21] K. Lonsdale, *Nature* **122** (1928) 810
- [22] K. Lonsdale, *Proc. R. Soc. A* **123** (1929) 494-515
- [23] K. Lonsdale, *Trans. Faraday Soc.* **25** (1929) 352-366
- [24] W.H. Bragg, R.E. Gibbs, *Proc. R. Soc. Lond. A* **109** (1925) 405-426
- [25] V.M. Goldschmidt, “*Geochemische Verteilungsgesetze, VII: Die Gesetze der Krystallochemie*”, Skrifter Norsk. Vid. Akademie, Oslo, Mat. Nat. Kl., 1926
- [26] L. Pauling, *J. Am. Chem. Soc.* **51** (1929) 1010-1026
- [27] W.L. Bragg, *Z. Kistallogr.* **74** (1930) 237-305
- [28] M.A. Rosanoff, *J. Am. Chem. Soc.* **28** (1906) 114-121
- [29] J.M. Bijvoet, A.F. Peerdeman, A.J. van Bommel, *Nature* **168** (1951) 271-272
- [30] T.J. Kealy, P.L. Pauson, *Nature* **168** (1951) 1039-1040
- [31] S.A. Miller, J.A. Tebboth, J.F. Tremaine, *J. Chem. Soc* (1952) 632-635
- [32] G. Wilkinson, M. Rosenblum, M.C. Whiting, R.B. Woodward, *J. Am. Chem Soc.* **74** (1952) 2125-2126
- [33] E.O. Fischer, W.Z. Pfab, *Naturforsch. B* **7** (1952) 377-379
- [34] L. Pauling, R.B. Corey, H.R. Branson, *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **37** (1951) 205-211
- [35] R.B. Corey, L. Pauling, *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **37** (1951) 251-256
- [36] J.D. Watson, F.H.C. Crick, *Nature* **171** (1953) 737-738
- [37] D.W. Green, V.M. Ingram, M.F. Perutz, *Proc. Royal Soc. Lond. A* **225** (1954) 287-307
- [38] M.F. Perutz, M.G. Rossmann, A.F. Cullis, H. Muirhead, G. Will, A.C.T. North, *Nature* **185** (1960) 416-422
- [39] J.C. Kendrew, R.E. Dickerson, B.E. Strandberg, R.G. Hart, D.R. Davies, D.C. Phillips, V.C. Shore, *Nature* **185** (1960) 422-427
- [40] C.G. Shull, J.S. Smart, *Phys. Rev.* **76** (1949) 1256
- [41] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfeleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Böni, *Science* **323** (2009) 915-919
- [42] E.J. Wilson, “*Fifty Years of Synchrotrons*”, EPAC 96: Proceedings of the Fifth European Particle Accelerator Conference, Barcelona, 1996
- [43] J.D. Jackson, W.K.H. Panofsky, “*EDWIN MATTISON MCMILLAN: A Biographical Memoir*”, National Academy of Sciences, Washington D.C., 1996
- [44] V.I. Veksler, *Comptes Rendus (Doklady) de l’Academie Sciences de l’URSS* **43(8)** (1944) 329-331
- [45] Protein Data Bank, *Nature New Biol.* **233** (1971) 223
- [46] E.F. Jr Meyer, *Nature* **232** (1971) 255-257
- [47] E.F. Jr Meyer, *Biopolymers* **13** (1974) 419-422
- [48] E.F. Jr Meyer, C.N. Morimoto, J. Villarreal, H.M. Berman, H.L. Carrell, R.K. Stodola, T.F. Koetzle, L.C. Andrews, F.C. Bernstein, H.J. Bernstein, J. Villarreal, *Fed. Proc.* **33** (1974) 2402-2405
- [49] Collaborative Computational Project, *Acta crystallogr. D* **50** (1994) 760-763
- [50] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1951-1953
- [51] D. Levine, P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 2477-2480
- [52] A.L. Mackay, *Physica* **114A** (1982) 609-613
- [53] M. Barrer, *J. Chem. Soc.* (1948) 2158-2163
- [54] B.F. Hoskins, R. Robson, *J. Am. Chem. Soc.* **111** (1989) 5962-5964
- [55] O.M. Yaghi, H. Li, *J. Am. Chem. Soc.* **117** (1995) 10401-10402

- [56] H. Li, M. Eddaoudi, M. O’Keeffe, O.M. Yaghi, *Nature* **402** (1999) 276-279
- [57] S.C. Harrison, A.J. Olson, C.E. Schutt, F.K. Winkler, G. Bricogne, *Nature* **276** (1978) 368-373
- [58] C. Abad-Zapatero, S. S. Abdel-Meguid, J. E. Johnson, A. G. W. Leslie, I. Rayment, M. G. Rossmann, D. Suck, T. Tsukihara, *Nature* **286** (1980) 33-39
- [59] I.A. Wilson, J.J. Skehel, D.C. Wiley, D. C. *Nature* **289** (1981) 366-373
- [60] J. Deisenhofer, O. Epp, K. Miki, R. Huber, H. Michel, *Nature* **318** (1985) 618-624
- [61] M.S. Weiss, U. Abele, J. Weckesser, W. Welte, E. Schiltz, G.E. Schulz, *Science* **254** (1991) 1627-1630
- [62] J.P. Abrahams, A.G. Leslie, R. Lutter, J.E. Walker, *Nature* **370** (1994) 621-628
- [63] E. Pebay-Peyroula, G. Rummel, J.P. Rosenbusch, E.M. Landau, *Science* **277** (1997) 1676-1681
- [64] S.G.F. Rasmussen, H-J. Choi, D.M. Rosenbaum, T.S. Kobilka, F.S. Thian, P.C. Edwards, M. Burghammer, V.R.P. Ratnala, R. Sanishvili, R.F. Fischetti, G.F.X. Schertler, W.I. Weis, B.K. Kobilka, *Nature* **450** (2007) 383-387
- [65] A.H.J. Wang, G.J. Quigley, F.J. Kolpak, J.L. Crawford, J.H. Van Boom, G. Van Der Marel, A. Rich, *Nature* **282** (1979) 680-686
- [66] S.H. Kim, G.J. Quigley, F.L. Suddath, A. McPherson, D. Sneden, J. J. Kim, J. Weinzierl, A. Rich, *Science* **179** (1973) 285-288
- [67] T.J. Richmond, J.T. Finch, B. Rushton, D. Rhodes, A. Klug, *Nature* **311** (1984) 532-537
- [68] M.M. Yusupov, G.Z. Yusupova, A. Baucom, K. Lieberman, T.N. Earnest, *Science* **292** (2001) 883-896
- [69] P. Cramer, D.A. Bushnell, R.D. Kornberg, *Science* **292** (2001) 1863-1876
- [70] A.L. Gnat, P. Cramer, J. Fu, D.A. Bushnell, R.D. Kornberg, *Science* **292** (2001) 1876-1882

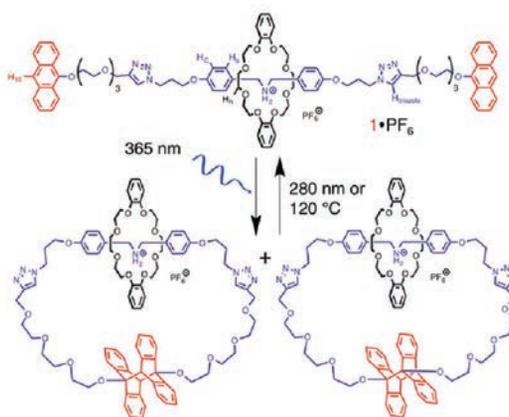
## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

## INTERCONVERSÃO [2]ROTAXANO – [2]CATENANO INDUZIDA PELA LUZ

Investigadores europeus descreveram um sistema molecular entrelaçado mecanicamente que pode alternar, de modo reversível, entre um rotaxano e catenano.

Os rotaxanos, assim como os catenanos, são grupos de moléculas importantes na área da electrónica molecular. Os rotaxanos são macromoléculas compostas por um anel macrocíclico em torno de um eixo molecular com uma forma que faz lembrar um haltere. Os catenanos, por sua vez, são formados por dois ou mais macrociclos interligados entre si. A síntese de um rotaxano é relativamente simples, ao contrário da de um catenano. A síntese de um rotaxano que se transforme num catenano é também bastante difícil.

Recentemente, um equipa de investigadores liderada por Alberto Credi, da Universidade de Bolonha, mostrou que a luz pode ser usada como estímulo para a interconversão reversível entre um [2]rotaxano e um [2]catenano. Este processo passa por uma fotocicloimerização  $[4\pi+4\pi]$  totalmente reversível dos grupos antraceno terminais do rotaxano.



Esta descoberta, dizem os investigadores, pode ser útil para a produção de dispositivos à escala nano com propriedades que possam ser controladas pela luz.

(adaptado de “Light drives unusual rotaxane-to-catenane transformation”, <http://www.rsc.org/chemistry-world/2015/01/rotaxane-catenane-transformation-light> | Arnaud Tron, Henri-Pierre Jacquot de Rouville, Aurélien Ducrot, James H. R. Tucker, Massimo Baroncini, Alberto Credi, Nathan D. McClenaghan. *Chem. Commun.* **51** (2015) 2810-2813)

**Paulo Mendes**  
(pjpgm@uevora.pt)

# SIMPLICIDADE NA CIÊNCIA

J. Lima-de-Faria\*

Instituto de Investigação Científica Tropical  
jlimadefaria@hotmail.com

**Simplicity in Science** – *A short analysis of the simplicity in Science is presented, and a crystallographic example of this simplicity is given as the description of crystal structures of general formulas  $AB$ ,  $AB_2$ ,  $AB_3$ ,  $AB_4$ , based on cubic or hexagonal close packings of the large atoms, with the small atoms occupying the octahedral or tetrahedral interstices, after an appropriate interpretation and representation by condensed models.*

É feita uma breve análise sobre a simplicidade na Ciência, e é apresentado um exemplo dessa simplicidade em Cristalografia, num quadro de estruturas cristalinas de fórmulas gerais  $AB$ ,  $AB_2$ ,  $AB_3$ ,  $AB_4$ , baseadas em empilhamentos densos, cúbico ou hexagonal dos átomos maiores, com os átomos pequenos ocupando os interstícios octaédricos ou tetraédricos. Uma interpretação adequada e a representação por meio de modelos condensados dessas estruturas, põem em evidência a semelhança e simplicidade dessas estruturas.

É espantosa a enorme diversidade da Natureza, mas também é igualmente espantoso que, em muitos casos, as regras e os mecanismos que a governam sejam muito simples. Paul Dirac foi um dos cientistas mais interessados pela simplicidade e beleza da ciência, e escreveu: "Na sua essência a Natureza é simples" [1].

A simplicidade da Ciência é uma consequência da simplicidade escondida da Natureza. Para Einstein "o que é mais incompreensível no nosso Universo é ele ser compreensível" [2]. Esta simplicidade da Ciência é possivelmente parte da resposta à perplexidade de Einstein.

Na Física, na Química, e na Cristalografia, assim como noutros ramos da ciência, encontramos muitas vezes essa simplicidade. Na Física as leis são normalmente representadas por expressões matemáticas simples. No que diz respeito à Química podemos recordar uma das suas leis fundamentais, a lei das proporções múltiplas, que estabelece: "quando dois elementos se combinam para formar mais do que um composto, os pesos de um elemento que se combina com o mesmo peso do outro estão na razão de números inteiros e pequenos". Esta lei foi estabelecida por John Dalton, cerca de 1803, e resultou largamente da sua especulação sobre as bases da teoria atômica, que veio a simplificar imenso a ciência da química.

Na Cristalografia, uma das leis fundamentais é a lei de Haüy, que estabelece que: "se escolhermos três faces num cristal como planos de coordenadas, e uma quarta face como unidade, os índices de todas as faces e as arestas são números inteiros, e usualmente pequenos". É curioso notar um certo paralelismo entre a lei química de Dalton e a lei cristalográfica de Haüy.

Como cristalógrafo vou tratar agora, com mais detalhe, alguns aspectos da cristalografia. Em cristalografia, para des-

crever as estruturas cristalinas, existem duas ferramentas fundamentais: a representação das estruturas por meio de modelos atômicos e o uso de fórmulas estruturais. A representação das estruturas pode ser feita de várias maneiras: por meio de modelos de bolas e pequenas hastes que as ligam, pela projecção dos átomos num dos lados da malha unitária; pela distribuição dos átomos em perspectiva na malha unitária, pela descrição da coordenação poliédrica dos átomos, e pelo empilhamento atômico. Uma outra maneira de representação é por sobreposição de camadas de átomos, os chamados *modelos condensados* [3].

A maior parte das estruturas cristalinas podem ser descritas pela sobreposição de camadas de átomos todas iguais, ou por duas diferentes que alternam. As camadas são representadas por folhas de acetato transparente, e os átomos desenhados por círculos de tamanhos diferentes. No caso de estruturas baseadas em empilhamentos densos dos átomos maiores, com átomos mais pequenos ocupando os interstícios desses empilhamentos, foram preparadas folhas padrão com todos os interstícios desenhados (quer octaédricos quer tetraédricos), e onde é fácil marcar os interstícios que estão ocupados. As camadas transparentes padrão colocam-se num suporte apropriado para permitir uma visualização 3D da estrutura cristalina.

Paul Moore [4] atribuiu grande importância à representação das estruturas e defendeu que se escolhermos a descrição apropriada descobriremos que muitas estruturas são baseadas em empilhamentos densos que anteriormente não tinham sido descritas como tais [5]. Num artigo recente de J. Lima-de-Faria [6] são descritas 322 estruturas cristalinas baseadas em empilhamentos densos, e mais 135 baseadas noutros tipos de empilhamento, num sentido mais geral.

As fórmulas estruturais que caracterizam as estruturas cristalinas são também muito importantes para a sua compre-

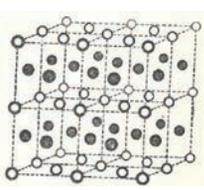
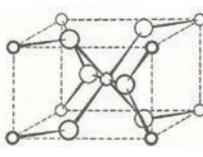
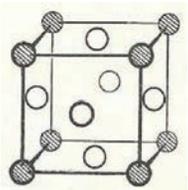
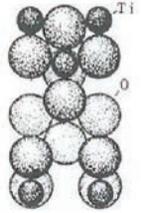
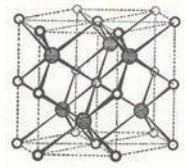
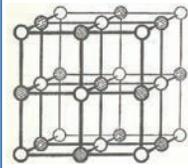
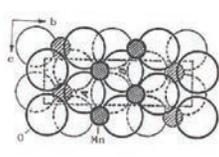
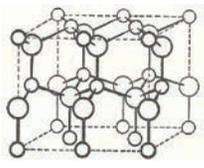
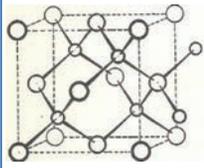
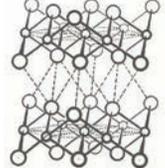
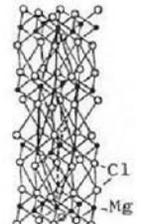
\* Investigador Coordenador Jubilado

ensão, e a sua notação deve ser o mais evidente possível. Foram várias as notações que foram propostas para as estruturas cristalinas, mas destas quero destacar a de Nigli [7] e a de Machatschki [8]. Em 1965 J. Lima-de-Faria [9] propôs uma notação para os tipos estruturais inorgânicos, e em 1976, esta foi adaptada por J. Lima-de-Faria e M. O. Figueiredo [10] como fórmulas estruturais das estruturas cristalinas. Mais tarde, estas fórmulas estruturais foram recomendadas pela Comissão Internacional de Nomenclatura da União Internacional de Cristalografia [11].

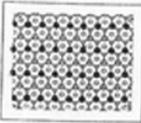
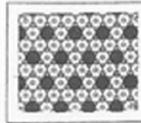
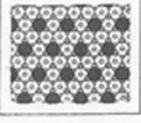
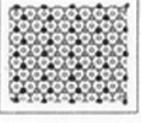
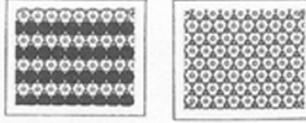
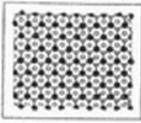
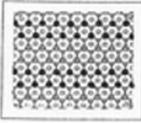
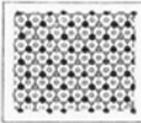
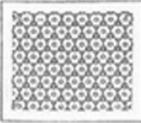
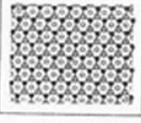
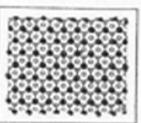
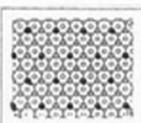
Vamos agora considerar um conjunto de estruturas cristalinas de compostos de fórmulas gerais  $AB$ ,  $AB_2$ ,  $AB_3$  e  $AB_4$ , e comparar a sua representação convencional com a representação por meio dos modelos condensados.

Se usarmos a sua representação convencional, baseada na distribuição geométrica dos átomos ou através da sua coordenação poliédrica, e se usarmos modelos cristalográficos, tais como os de bolas e hastes, ou formados por poliedros de coordenação, torna-se difícil visualizar o arranjo dos átomos, e as estruturas parecem complexas e todas muito diferentes (Figura 1).

Se, no entanto, fizermos uma interpretação apropriada dessas estruturas e usarmos como representação os modelos condensados, verifica-se que estas estruturas são semelhantes, todas baseadas em empilhamentos densos, formadas por camadas muito simples, todas iguais, ou duas alternadas, com uma distribuição simples e simétrica dos seus átomos (Figura 2).

AB		AB <sub>2</sub>		AB <sub>3</sub>	
Tetraauricupride CuAu P4/mmm		Rutile TiO <sub>2</sub> P4 <sub>2</sub> /mm		Auricupride Cu <sub>3</sub> Au Pm $\bar{3}$ m	
					
Hongshiite PtCu R32...		Scrutinyite PbO <sub>2</sub> Pcan	Anatase TiO <sub>2</sub> I4 <sub>1</sub> /amd	Dyscrasite Ag <sub>3</sub> Sb Pmm2	
					
Nickeline NiAs P6 <sub>3</sub> /mmc	Halite NaCl Fm $\bar{3}$ m	Ramsdellite MnO <sub>2</sub> Pbnm		Molysite FeCl <sub>3</sub> R $\bar{3}$	Molybdate MoO <sub>3</sub> Pbnm
					
<b>AB<sub>4</sub></b>					
Wurtzite-2H ZnS P6 <sub>3</sub> mc	Sphalerite ZnS F $\bar{4}$ 3m	Melonite NiTe <sub>2</sub> P $\bar{3}$ m1	Chloromagnesite MgCl <sub>2</sub> R $\bar{3}$ m	Roaldite N(Fe,Ni) <sub>4</sub> Pm $\bar{3}$ m	
					

**Figura 1** – Representação convencional de algumas estruturas cristalinas de compostos de fórmulas gerais  $AB$ ,  $AB_2$ ,  $AB_3$  e  $AB_4$ . A maioria das figuras aqui representadas são do livro “Structural Inorganic Chemistry”, de A. F. Wells, 1950, reproduzidas com a autorização da Oxford University Press ([www.oup.com](http://www.oup.com))

AB		AB <sub>2</sub>		AB <sub>3</sub>	
Tetraauricupride [CuAu] <sup>c</sup> P4/mmm		Rutile Ti <sup>o</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>h</sup> P4 <sub>2</sub> /mnm		Auricupride [Cu <sub>3</sub> Au] <sup>c</sup> Pm $\bar{3}$ m	
					
Hongshiite [PtCu] <sup>c</sup> R32...		Scrutinyite Pb <sup>o</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>h</sup> Pcan	Anatase Ti <sup>o</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>c</sup> I4 <sub>1</sub> /amd	Dyscrasite [Ag <sub>3</sub> Sb] <sup>h</sup> Pmm2	
					
Nickeline Ni <sup>o</sup> [As] <sup>h</sup> P6 <sub>3</sub> /mmc	Halite Na <sup>o</sup> [Cl] <sup>c</sup> Fm $\bar{3}$ m	Ramsdellite Mn <sup>o</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>h</sup> Pbnm		Molysite Fe <sup>o</sup> [Cl <sub>3</sub> ] <sup>h</sup> R $\bar{3}$	Molybdate Mo <sup>o</sup> [O <sub>3</sub> ] <sup>c</sup> Pbnm
					
Wurtzite-2H Zn[S] <sup>h</sup> P6 <sub>3</sub> mc	Sphalerite Zn[S] <sup>c</sup> F $\bar{4}$ 3m	Melonite Ni <sup>o</sup> [Te <sub>2</sub> ] <sup>h</sup> P $\bar{3}$ m1	Chloromagnesite Mg <sup>o</sup> [Cl <sub>2</sub> ] <sup>c</sup> R $\bar{3}$ m	Roaldite Ni <sup>o</sup> [(Fe,Ni) <sub>4</sub> ] <sup>c</sup> Pm $\bar{3}$ m	
					

**Figura 2** – Representação das estruturas cristalinas de alguns compostos de fórmulas gerais AB, AB<sub>2</sub>, AB<sub>3</sub> e AB<sub>4</sub>, baseadas no empilhamento denso dos átomos maiores, com os átomos mais pequenos ocupando os interstícios octaédricos ou tetraédricos, usando modelos condensados. Quando só uma camada está representada isso significa que as camadas são todas iguais, se estão representadas duas camadas significa que essas camadas se sobrepõem alternadamente. As fórmulas estruturais contêm as características das estruturas, colocando-se primeiro os átomos intersticiais com a coordenação indicada como expoente (o se octaédrica e t se tetraédrica), e a seguir os átomos maiores de empilhamento denso dentro de parênteses rectos, com a indicação do tipo de empilhamento, se cúbico ou hexagonal, também como expoente (c para cúbico e h para hexagonal). A simplicidade destas estruturas é evidente.

## REFERÊNCIAS

- [1] P. Dirac, citado por H. Corbi e K. Helge em “Paul Dirac et la Beauté de la Physique”, revista “*Pour la Science*”, n.º 189, Julho de 1993, p.78
- [2] A. Einstein, citado por Rómulo de Carvalho em “O «saber» e o «compreender»”, revista “*Ciência*”, 1, n.º 2 (1949) 37
- [3] J. Lima-de-Faria, *Z. Kristallogr.*, **122**, 5/6 (1965) 346-358
- [4] P.B. Moore, *Aust. J. Chem.*, **45** (1992) 1335-1354
- [5] P.B. Moore, (*private communication*) (1995)
- [6] J. Lima-de-Faria, *Eur. J. Mineral.*, **24** (2011) 163-169
- [7] P. Nigli, “Grundlagen der Stereochemie”, Verlag Birkhäuser, Basel, 1945  
French translation, “Les bases de la Stéreochemie”, Dunod, Paris, 1952
- [8] F. Machatschki, *Monatsh. Chem*, **77** (1947) 333-342
- [9] J. Lima-de-Faria, *Z. Kristallogr.*, **122**, 5/6 (1965) 359-374
- [10] J. Lima-de-Faria e M.O. Figueiredo, *J. Solid State Chem.*, **16** (1976) 7-20
- [11] J. Lima-de-Faria, E. Hellner, F. Libau, E. Makovicky, e E. Parthé, *Acta Crystallogr.*, **A46** (1990) 1-11

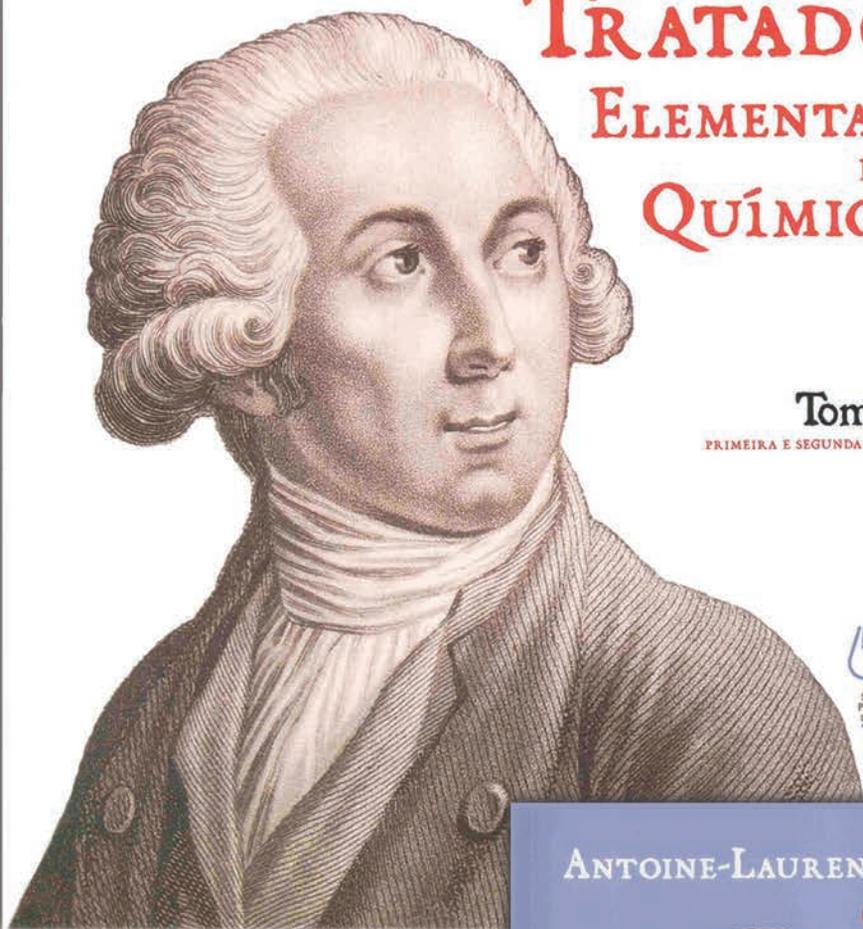


ANO INTERNACIONAL DA LUZ 2015 - CALL FOR PAPERS

Envie os seus manuscritos para [bquimica@quimica.uminho.pt](mailto:bquimica@quimica.uminho.pt)

ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

TRATADO  
ELEMENTAR  
DE  
QUÍMICA



Tomo I

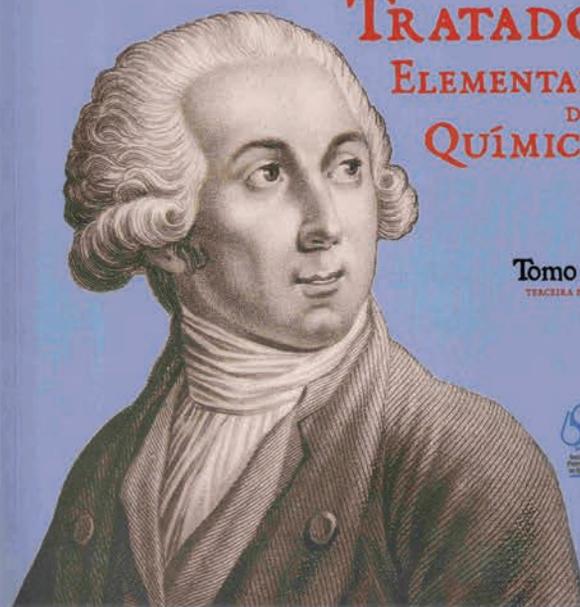
PRIMEIRA E SEGUNDA PARTES



SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE QUÍMICA

ANTOINE-LAURENT LAVOISIER

TRATADO  
ELEMENTAR  
DE  
QUÍMICA



Tomo II

TERCEIRA PARTE



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

# ONDAS, CRISTAIS E ESTRUTURA BIOMOLECULAR UMA PERSPECTIVA HISTÓRICA

Raquel Gonçalves-Maia\*

Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
rmcgonc@gmail.com

**Waves, Crystals and Biomolecular Structure - a historical perspective** – *Crystallographic analysis by X rays, a transversal and interdisciplinary technique, has been supplying us with new information about structure at the atomic-molecular level of certain atom groups in the molecules of life and its relationship with biological function. Structural Biology presents expansion and creativity. Today, it is possible to study not only structures at the steady state, but also dynamic events with crystals.*

*The scientific progress, both theoretical and applied, attained in Physics, in Chemistry, in Biochemistry and in Biology, in connection with a parallel progress in Mathematics and Computer Science, was crucial for the full exploitation of the potential offered by von Laue's and Bragg's old methods. The knowledge of bio-molecular structures and mechanisms that support living cells establish new disciplines that are connected to Pharmacology and Medicine.*

*It is one hundred years in 2014 that the Nobel Prize for Physics was awarded to Max von Laue "for his discovery of the diffraction of X-rays by crystals"; 2014 was elected International Year of Crystallography. The historical component of this extraordinary adventure deserves being told.*

A análise cristalográfica por raios-X, interdisciplinar e transversal, tem vindo a oferecer-nos novas informações sobre a estrutura a nível atómico-molecular e a relação existente entre certos agrupamentos de átomos e a sua funcionalidade biológica. A Biologia Estrutural apresenta expansão e criatividade. Hoje, é possível estudar, não só estruturas em estado de equilíbrio, mas também acontecimentos dinâmicos com cristais.

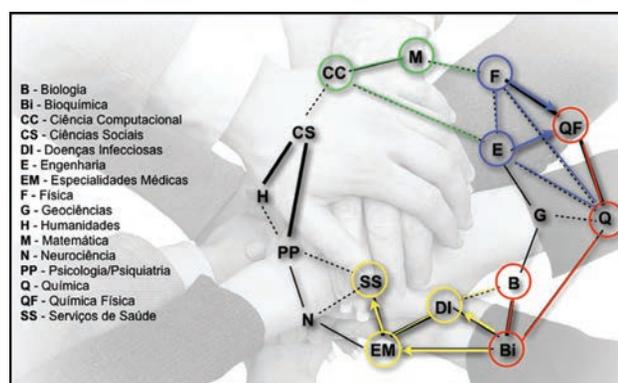
Os desenvolvimentos científicos, teóricos e aplicados, na Física, na Química, na Bioquímica e na Biologia, associados aos progressos de carácter matemático e computacional, foram fundamentais para a total exploração do potencial dos velhos métodos de von Laue e dos Bragg. O conhecimento das estruturas biomoleculares e dos mecanismos que mantêm as células vivas fundamentam novas disciplinas, disciplinas interligadas com a Farmacologia e a Medicina. Em 2014 faz cem anos que foi entregue o Prémio Nobel da Física a Max von Laue “pela descoberta da difracção dos raios-X pelos cristais”; 2014 foi eleito o Ano Internacional da Cristalografia. A componente histórica desta extraordinária aventura merece ser contada.

## 1. INTRODUÇÃO

A Química é uma ciência muito diversificada. No entanto, creio que todos concordamos que o conhecimento das estruturas moleculares ocupa uma posição central que é o verdadeiro apoio da síntese e do estudo da actividade química – sejam eles dirigidos à criação de moléculas de aplicação prática ou um “simples” desafio intelectual [1–3]. Compreender as estruturas moleculares e as transformações ocorridas nessas mesmas estruturas tem sido, porventura, o maior desafio da ciência química ao longo do século XX, propagando-se pelo século XXI; e, utilizando palavras de Roald Hoffmann, é ainda mais a “criação” do que a “descoberta” o grande objectivo da comunidade dos químicos [4].

Estrutura molecular? Estrutura tridimensional...

A Física ajuda. Ajuda teoricamente através da determinação das energias envolvidas nas ligações. Ajuda tecnicamente, conjugando-se com a Engenharia, a fim de elaborar



**Figura 1** – Mapa de Consenso de Klavans e Boyack, mostrando vertentes privilegiadas de interação

aparelhagem apropriada. A evolução matemática e computacional, altamente sofisticada, coopera [5]. Sem umas e sem outras nunca se poderia ter obtido a demonstração tão rigorosa de previsões estruturais moleculares; nem nunca as Ciências Médicas e Farmacológicas, a par com os Serviços de Saúde, delas teriam usufruído.

Neste contexto, o experimentalista químico é essencial – o uso da observação empírica, da interpretação química

\* Professora Catedrática aposentada

apoiada em conceitos químicos ligados às propriedades manifestadas pela matéria, faz toda a diferença. É a compreensão em termos humanos, ainda que sempre com a pretensão de objectividade...

Em geral, as hipóteses são muitas e as soluções de uma correlação, de uma aproximação estatística ou de uma série de cálculo dir-se-iam “infinitas”. A opção final segue o princípio de Occam, favorece o mecanismo mais simples, sem nunca esquecer que outros existem.

Um químico olha para o lauegrama de uma molécula e, tal como Miguel Ângelo enfrentando o seu “Moisés” [6], grita-lhe: *FALA!*

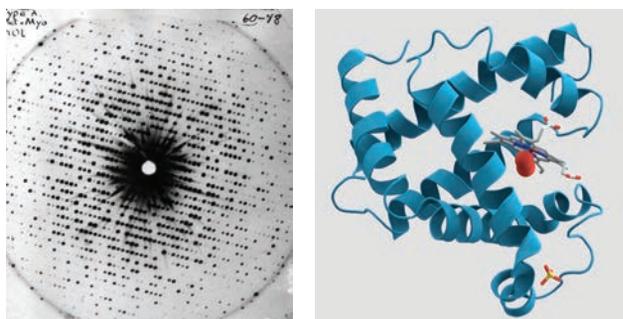


Figura 2 – Lauegrama da mioglobina e correspondente estrutura

## 2. RAIOS-X E REDE CRISTALINA

Tudo começou como muitas vezes começa... *Uma obra de acaso para espíritos preparados*, assim disse Louis Pasteur.

Foi na Alemanha, em 1895, e teve como protagonista um “velho” professor – Wilhelm Röntgen tinha então 50 anos; ao estudar o comportamento dos raios catódicos num tubo de vácuo, foi confrontado com um fenómeno inédito. Avisou outros raios. Chamou-lhes raios-X, por x ser a incógnita favorita dos matemáticos [7].

Os raios-X eram muito penetrantes, atravessavam a carne, expunham os ossos. Com raios-X, fotografou a mão da sua mulher, Anna Bertha Ludwig. Em Dezembro de 1895, após um trabalho *non-stop* outonal, apresentou a sua famosa “Primeira Comunicação” na Sociedade Científica de Wurtzburgo e o artigo foi imediatamente publicado – a tempo de Röntgen o enviar aos amigos juntamente com os ossos da mão de Bertha, como prenda de Natal.



Figura 3 – Raios-X por Wilhelm Röntgen da mão esquerda de sua mulher

Röntgen tinha conhecido a sua futura mulher num café de estudantes. Os cafés – quem diria! – são fundamentais na nossa história.

Era no Café Lutz, em Munique, que Debye, Sommerfeld e jovens investigadores debatiam ideias, rabiscavam as mesas com diagramas e cálculos, enfim, davam à luz... Por volta de 1910, Max von Laue tem 30 anos e discute com Paul Ewald a dispersão dos raios-X e as redes cristalinas [8]. Walter Friedrich e Paul Knipping escolhem uma primeira “vítima” para ser submetida aos ditos raios: um cristal de sulfato de cobre; depois, foi a vez de cristais de sulfureto de zinco, de sulfureto de chumbo e de cloreto de sódio. Assim nasceu a difracção dos raios-X pelos cristais e os poderosos efeitos de interferência ilustrados nos, tão admiráveis quanto confusos, “diagramas de von Laue”.

Para o nosso afamado cloreto de sódio subsistia a dúvida. Existiria a molécula isolada, composta por dois iões, ou tratava-se de uma rede cristalina? Competiu aos Bragg resolver o seu corpo tridimensional.

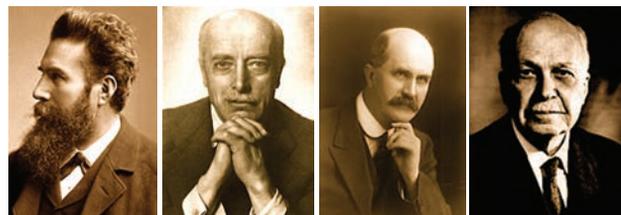


Figura 4 – Wilhelm Röntgen, Max von Laue, William Bragg e Lawrence Bragg

O pai, o britânico William Henry Bragg, professor de Matemática e Física em Adelaide, na Austrália, era casado e pai de dois rapazes e uma rapariga. Em 1908 tinha aceitado a cátedra de Física na Universidade de Leeds. Entretanto, o seu filho mais velho, William Lawrence Bragg graduara-se em Matemática e em Física e investigava na Universidade de Cambridge [9]. O pai experimentalista, o filho teórico: uma dupla de respeito!

A Grande Guerra estava em curso. Quando em Novembro de 1915 souberam que lhes tinha sido atribuído o Prémio Nobel foi magra a consolação face à morte de Robert, o irmão mais novo de Lawrence, na batalha de Gallipoli. Lawrence Bragg, 25 anos, o mais jovem até aos dias de hoje galardoado com o Nobel. Nada demais! Se é certo que o dispositivo experimental foi obra do pai, a célebre fórmula que relaciona comprimento de onda da radiação ( $\lambda$ ) com distância entre planos do cristal ( $d$ ) foi obra do filho:

$$n\lambda = 2d \sin\theta$$

## 3. BIOLOGIA ESTRUTURAL

“What counts in science is to be not so much the first but the last...”, escreveu Erwin Chargaff em consequência do esquecimento a que fora votado a propósito da decifração estrutural do ADN.

Mas nós, a propósito do surgimento da “Biologia Molecular”, melhor diríamos Biologia Estrutural, não vamos esquecer o trabalho pioneiro de William Astbury, desenvolvido primeiro no Laboratório Davy-Faraday da *Royal Institution* (tendo então William Bragg como director) e, depois, na Universidade de Leeds [10]. Os estudos estruturais de fibras biológicas foram o seu maior contributo. Nascia a “Biologia Molecular”, designação que, se não foi invenção sua, foi por ele muito apoiada. Da estrutura para a função...

Os diagramas obtidos por difracção de raios-X, porém, eram difusos, imprecisos – fraca aparelhagem e cálculos difíceis, se não impossíveis. A análise cristalográfica por raios-X teria necessariamente de evoluir – tecnicamente, experimentalmente e teoricamente; e de se expandir – dos cristais simples para o material microcristalino, das pequenas moléculas para as grandes moléculas, dos sais inorgânicos para as moléculas da vida.

John Desmond Bernal, o tão controverso “*Sage*”, colega de Astbury na *Royal Institution* e, depois, professor investigador nas Universidades de Cambridge e de Londres, desenvolveu e optimizou, nos anos 1920-30, o equipamento de cristalografia de cristal único [11]. Um fotogoniómetro de raios-X de Bernal foi mesmo comercializado. Estudou a estrutura da grafite primeiro e, em correspondência com Astbury, a estrutura de vários aminoácidos. Os “diagramas de von Laue”, finalmente, tornam-se nítidos, decifráveis, transpiram conhecimento... mas como descodificá-los?

Os diagramas são imagens bidimensionais que se querem transformados em estruturas tridimensionais de moléculas. É crítico saber o valor de ângulos e distâncias de disposição de conjuntos singulares de átomos uns em relação aos outros. As propriedades físicas, químicas e biológicas das moléculas – a sua “função” – deles dependem.



Figura 5 – William Astbury, John Bernal e Dorothy Hodgkin

É imperativo, todavia, que o investigador possua uma forte dose de imaginação (não confundir com imaginário) e de percepção espacial para entender a forma tridimensional a partir de dados bidimensionais. “*Yes, I can see it!*”, dizia Dorothy Crowfoot Hodgkin, visionando em contra luz o seu “*donut*” de insulina [12]. A linguagem da química é altamente pictórica, “arte abstracta” diríamos, não livre de ambiguidades, mas algo hermética – só mesmo para “iniciados”...

## CÁLCULOS E MAIS CÁLCULOS

O primeiro recurso urgente adveio das chamadas “funções de Patterson”, cuja metodologia fazia uso das velhas “séries de Fourier”. Cálculos infundáveis... As “tiras Beevers-Lipson”, com valores pré-determinados para algumas funções trigonométricas, foram uma boa ajuda. Num resumo simplista diríamos que, desde que se dispusesse de bons diagramas de difracção de raios-X, era possível construir, com certo grau de aproximação, mapas de densidade electrónica de um cristal – juntar o quantitativo ao qualitativo, agregar valores de distâncias e de ângulos entre os átomos da molécula, anexar orientações no espaço.



Figura 6 – “Computing Methods and the Phase Problem in X-ray Analysis”, Pennsylvania State College, PA, USA (1950). Da esquerda para a direita: J. M. Bijvoet, J. F. Schouten, H. Lipson, E. G. Cox, C. H. MacGillivray, M. F. Perutz, C. W. Bunn, C. A. Beevers, R. Pepinsky, J. M. Robertson and E. Grison

Um segundo recurso, que veio a mostrar-se fundamental, foi o uso de isomorfos, a substituição controlada de um ou mais átomos pesados na molécula em estudo; a comparação dos mapas de densidade electrónica, com e sem substituintes, tornou-se um poderoso auxiliar de interpretação estrutural. Pelo menos no que respeita aos cristais de proteínas a primeira sugestão deve-se a John Desmond Bernal. Regressemos, pois, a Desmond Bernal [11,13]. Excepcional, na total acepção da palavra! Comunista no Reino Unido dos anos 1930, amante do amor livre, várias mulheres e vários filhos, um “*Sage*” com todos os condimentos, incluindo uma obra gigantesca no âmbito da História sociológica da Ciência, a figura do protagonista “*Constantine*” da novela “*The Search*” de C. P. Snow...

## BARREIRAS DE SOM E LUZ

Tantas moléculas decifradas, tantos os que por Bernal foram estimulados! Dorothy Hodgkin e Max Perutz foram dois dos contaminados. Quando, em 1936, Perutz trocou Viena de Áustria por Cambridge perguntou: “Como posso solucionar o problema da vida?” Bernal respondeu-lhe: “O segredo da vida está na estrutura das proteínas. Resolve o problema por cristalografia de raios-X”. Estava parcialmente enganado, mas só parcialmente...

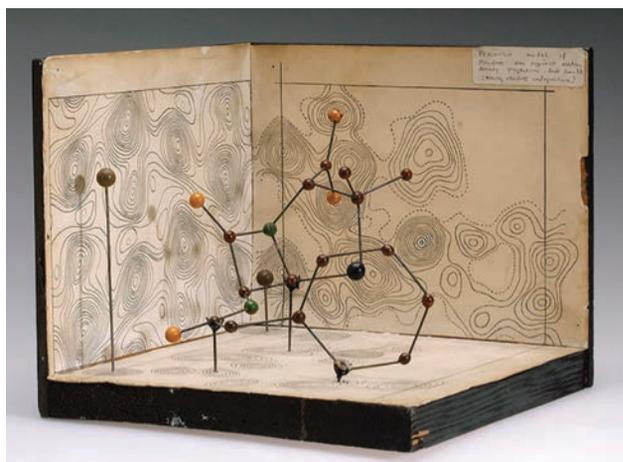


Figura 7 – Modelo da penicilina por Dorothy Hodgkin (1945)

Dorothy Crowfoot Hodgkin foi exemplar. Nem a sua artrite reumatóide alguma vez lhe quebrou o ânimo. Não quebrou o ânimo, mas quebrou ela “a barreira do som” – pelo menos assim o afirmou Lawrence Bragg quando ela decifrou a poderosa molécula da vitamina B<sub>12</sub> [12,14]. Foi o culminar de uma era espacial! A partir daí tudo se diria possível... E foi. Dorothy Crowfoot Hodgkin recebeu o Prémio Nobel da Química em 1964, “*A Mother of Three*”, como elucidou “muito a propósito” o *Daily Telegraph*.

Serão 35 anos tempo demais para esclarecer a estrutura tridimensional de uma pequena proteína, a insulina, pouco mais de 50 aminoácidos, com sub-unidades, pontes, monómero, dímero e hexâmero? Inimaginável o trabalho por detrás de tal empreendimento. E, para mais, foi preciso esperar que as ciências computacionais adquirissem a necessária maturidade.

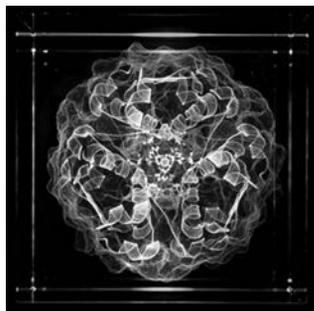
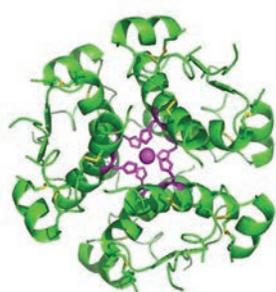


Figura 8 – Modelo do hexâmero de insulina humana e “Insulin”, escultura a laser sobre cristal por Bathsheba Grossmann (Cortesía da autora)

Foram muitos os colaboradores de Dorothy Hodgkin em tal empreendimento. Realçarei aqui, a título de homenagem, dois deles: Guy Dodson, o amigo de todas as virtudes, falecido em 2012; e Tom Blundell, o jovem cientista que pela primeira vez apresentou em público o modelo da insulina.

Max Perutz começou o estudo da hemoglobina do sangue – milhares de átomos para localizar no espaço – no Laboratório Cavendish, então sob a direcção de Lawrence Bragg, por volta de 1937. Em 1960, a revista *Nature* publicava a sua resolução estrutural. Dois anos antes, porém, o seu colega de grupo John Kendrew desvendara a estrutura da



Figura 9 – Guy Dodson e Tom Blundell

mioglobina: o grupo heme bem detalhado, a cadeia polipeptídica, as cadeias laterais, uma hélice alfa [15].

Uma certeza emergiu destas resoluções: a semelhança configuracional entre a mioglobina e a hemoglobina, ainda que a primeira seja muito mais pequena do que a segunda, correspondia-se com a semelhança das funções que desempenham nos organismos.

Em 1962, Max Perutz e John Kendrew receberam o Prémio Nobel da Química pelo desvendar da estrutura molecular das proteínas globulares. Nesse mesmo ano, foi outorgado a James Watson, Francis Crick e Maurice Wilkins o Prémio Nobel da Fisiologia ou Medicina pelas “descobertas relativas à estrutura molecular de ácidos nucleicos”. Neste enredo, seria um profundo desrespeito não referir o contributo de Rosalind Franklin, então já falecida, para a construção do modelo estrutural do ADN [16]. A “Fotografia 51”, com um X perfeito e sem incógnita, sempre ficará na história da Cristalografia de Raios-X!



Figura 10 – Rosalind Franklin e o logótipo da Universidade de Medicina e Ciência no Illinois (EUA), baseado na “Fotografia 51” do DNA

#### EM PORTUGAL

A análise cristalográfica por aplicação de raios-X com o fim de decifrar estruturas moleculares de compostos inorgânicos e orgânicos e, depois, bioorgânicos, disseminou-se um pouco por todo o mundo, por centros e escolas de investigação a maioria alocada em universidades.

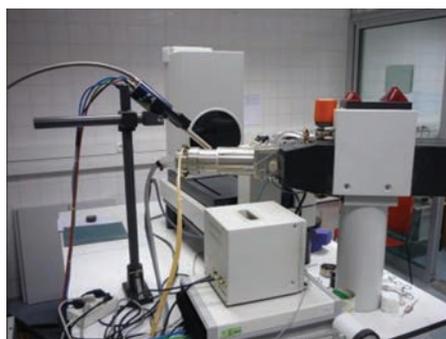
Em Portugal, em 1930, João Rodrigues de Almeida Santos, assistente do Departamento de Física da Universidade de Coimbra, voa até Manchester, ao encontro de Lawrence Bragg. Aí obtém o PhD com uma tese versando a decifração de estruturas do cloreto de cobalto e de sais de cloreto de cézio, rubídio e tálio de alguns heteropoliácidos, sem-

pre obtidas por difracção de raios-X. De regresso, adquiriu uma aparelhagem de raios-X com a qual efectuou novos estudos. Em 1947 publicou um artigo de revisão e divulgação da aplicação dos raios-X à determinação de estruturas no Boletim da Sociedade de Radiologia Médica [17].



**Figura 11** – João Rodrigues de Almeida Santos (Cortesia de Maria Susana Newton de Almeida Santos)

A partir dos anos 60 emergiram no nosso país novas áreas de investigação estrutural por cristalografia de raios-X, em particular estudos de macromoléculas de interesse biológico. Em 2006, a *Newsletter* da *International Union of Crystallography* publicou um artigo intitulado “*Portugal, past and present*”, onde as autoras nos dão conta da excelente evolução havida neste domínio [18].



**Figura 12** – Difractómetro de raios-X de ângulo rotativo de cobre, para difracção de cristal único, acoplado a um detector de área (tipo *image plate*) e a um sistema de refrigeração por corrente de azoto gasoso arrefecido (~100K). (Cortesia do Grupo de Cristalografia de Macromoléculas, XTAL, da FCT-NOVA)

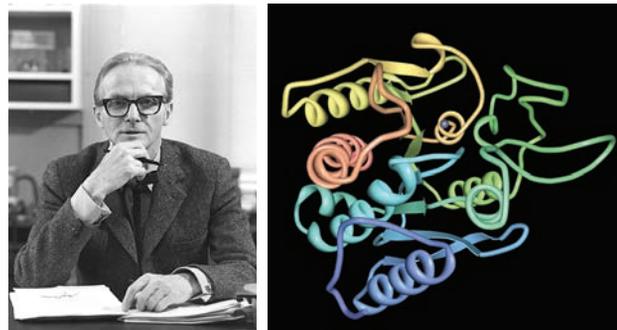
#### 4. RENOVAÇÃO E INOVAÇÃO

Em 1965, David Phillips, ao tempo no Laboratório Davy-Faraday da *Royal Institution*, decifrou com a resolução de 2,0 Å a proteína enzimática lisozima. David Phillips conseguiu explicar a actividade antibacteriana da lisozima, enzima que faz parte do sistema imunitário, e propor mesmo um mecanismo de actuação. Estudo importante, que permitiu generalizações sobre a procedimento dos enzimas.

Depois, em 1967, foi a vez da decifração estrutural da carboxipeptidase (CPA) por William Lipscomb, o “Coronel”, na Universidade de Harvard, da Ribonuclease A (RNase A) por David Harker, então no *Roswell Park Memorial Insti-*

*tute* da Universidade de Nova Iorque, da ribonuclease S (RNase S) por Frederic Richards, na Universidade de Yale, e da quimotripsina por David Blow, em Cambridge, na unidade de Max Perutz [1,19].

Impossível enumerar todos os feitos, um a um, a partir daqui.



**Figura 13** – William Lipscomb e modelo da estrutura da carboxipeptidase-A

Quando o *Protein Data Bank* foi criado, em 1970, o banco apenas continha referência à estrutura de sete proteínas; em 1976 estavam treze depositadas. No final de 2012 podiam ser consultadas 87089 estruturas 3D proteicas! Outras técnicas surgiram, mas o estudo estrutural de proteínas continua a ser maioritariamente feito por difracção de raios-X – cerca de 89% [20].

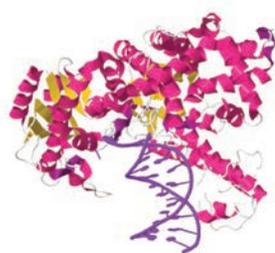
São vários os padrões de medida do sucesso da área científica da difractometria de raios-X para análise estrutural cristalográfica. Desde logo o número e a qualidade das atribuições de Prémios Nobel em Química que recompensam realizações neste domínio surgidas ao longo do século XX e propagando-se, com enorme vitalidade, pelo século XXI.

Em 1947/48 os cristalógrafos de todo o Mundo passaram a dispor de uma União Internacional – *International Union of Crystallography* (IUCr) – para além de um jornal específico, a *Acta Crystallographica* [21]. Depois, os *Crystallography Journals* multiplicaram-se.

Um outro padrão, muito significativo e, indubitavelmente, muito belo, da medida do sucesso deste domínio científico observa-se no seu impacte sobre a Arte. Logo em 1951, surgiu o *Festival of Britain*, em consequência de um desafio lançado entre cientistas, *designers* e industriais (fabricantes de tecidos, papel de parede e outros). A respectiva exposição chamou-se: “From atoms to patterns”. Diagramas de estruturas atómicas e de estruturas cristalinas foram os grandes inspiradores [22].

Mas não se ficou por aqui. Elaborações artísticas, como as de Bathsheba Grossmann (escultura a *laser* sobre cristal), de que é exemplo a esplêndida árvore da vida intitulada “*Life’s Code in Action*”, [23] representativa de um fragmento de DNA polimerase I, ou a escultura em aço “*Angel of the West*”, [24] de Julian Voss-Andreae exposta no *Scripps Research Institute* (Júpiter, Florida), onde uma par-

cela da estrutura da imunoglobulina se “confunde” com o Homem Vitruviano de Leonardo da Vinci, são expressivas alianças de Arte e análise estrutural cristalográfica.



**Figura 14** – Estrutura de DNA polimerase I (fragmento; RCSB PDB 1KLN) e “Life’s Code in Action”, escultura a laser sobre cristal por Bathsheba Grossmann (Cortesia da autora)



**Figura 15** – “Angel of the West”, escultura em aço de Julian Voss-Andreae (Cortesia do autor)

A análise estrutural por cristalografia de raios-X tem um século. Os seus fundamentos têm raízes profundas, mas vai longe o tempo em que obter um “belo” diagrama de raios-X significava obter um simples quadro de difração com manchas ordeiramente distribuídas. Depois, já para moléculas razoavelmente complexas, significava obter revelações nítidas, muitas, apresentando simetria e resolução [1,25].

Hoje, é possível estudar, não só estruturas em estado de equilíbrio, mas também acontecimentos dinâmicos com cristais. Hoje, o conhecimento das estruturas biomoleculares permite entender os mecanismos que mantêm as células vivas. Hoje, um “belo” diagrama é uma porta aberta para a criação de novas biomoléculas com novas funções, em interligação perfeita com a Farmacologia e a Medicina.

## REFERÊNCIAS

- [1] R. Gonçalves-Maia, “Dos Raios X à Estrutura Biomolecular”, Editora Livraria da Física, São Paulo, 2013
- [2] B. Rupp, “Biomolecular Crystallography: Principles, Practice, and Application to Structural Biology”, Garland Science, Nova Iorque, 2009
- [3] D. Sherwood, e J. Cooper, “Crystals, X-rays and Proteins – Comprehensive Protein Crystallography”, Oxford University Press, Oxford, 2011
- [4] “Roald Hoffmann on the Philosophy, Art, and Science of Chemistry”, ed. J. Kovac e M. Weisberg, Oxford University Press, Nova Iorque, 2012
- [5] R. Klavans, K.W. Boyack, *JASIST* **60** (2009) 455-476
- [6] Conta-nos a História que Miguel Ângelo, em alucinação perante a perfeição da sua obra, ter-lhe-á gritado “*Perché non parli?*”. A estátua encontra-se na Igreja de *San Pietro in Vincoli*, Roma; constitui parte do túmulo esculpido para o Papa Júlio II
- [7] G.F. Barker e W.C. Röntgen, “Röntgen Rays: Memoirs by Röntgen, Stokes, and J. J. Thomson”, Nabu Press, Charleston, 2010
- [8] M. Von Laue, “My Development as a Physicist - An Autobiography”, “In Memorium: Max von Laue” em “Fifty Years of X-Ray Diffraction”, ed. P.P. Ewald, V (1962); reimpressão para o Congresso IUCr XVIII, Glasgow (1999). <http://www.iucr.org/publ/50yearsofxraydiffraction>
- [9] J. Jenkin, “William and Lawrence Bragg, Father and Son: The Most Extraordinary Collaboration in Science”, Oxford University Press, Nova Iorque, 2008.
- [10] “X-Ray Marks the Spot: William Astbury and the Birth of Molecular Biology at Leeds”, org. K. Hall e E. Winterburn, Universidade de Leeds, Museu de História da Ciência, Tecnologia e Medicina. <http://www.leeds.ac.uk/heritage/Astbury/index.html>
- [11] “J.D. Bernal: A Life in Science and Politics”, ed. B. Swann e F. Arahamian, Verso, Londres, 1999
- [12] R. Gonçalves-Maia, “Dorothy Crowfoot Hodgkin: Pepsina, Penicilina, Colesterol, Vitamina B<sub>12</sub>, Insulina”, Edições Colibri, Lisboa, 2010
- [13] A. Brown, “J. D. Bernal – The Sage of Science”, Oxford University Press, Nova Iorque, 2005
- [14] G. Ferry, “Dorothy Hodgkin – A Life”, Granta Books, Londres, 1999
- [15] M.F. Perutz, “Molecular Biology in Cambridge” em “Cambridge Scientific Minds”, ed. P. Herman e S. Mitton, Cambridge University Press, Cambridge, 2002
- [16] B. Maddox, “Rosalind Franklin - The Dark Lady of DNA”, HarperCollins, London, 2003
- [17] Homenagem ao Prof. Doutor João R. de Almeida Santos, Universidade de Coimbra, abril 1997. [http://fisica.uc.pt/ax/pessoas/Homenagem\\_Almeida\\_Santos.pdf](http://fisica.uc.pt/ax/pessoas/Homenagem_Almeida_Santos.pdf)
- [18] M.A. Figueiredo, M. Costa, A.M. Damas, M.T. Duarte, e M.A. Carrondo, “Crystallography in Portugal. Portugal, past and present”, *IUCr Newsletter* **14(2)** (2006) 8
- [19] The Nobel Prizes [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/)
- [20] RCSB Protein Data Bank <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- [21] (IUCr) International Union of Crystallography <http://www.iucr.org/>
- [22] L. Jackson, “From atoms to patterns: Crystal Structure Designs from the 1951 Festival of Britain”, ed. Richard Dennis, Londres, 2008
- [23] Bathsheba Sculpture – Science Crystals <http://www.bathsheba.com/crystal/dnapolymerase/> (acedido a 13/02/2015)
- [24] Protein Sculptures: ‘Angel of the West’ – Julian Voss-Andreae, <http://julianvossandreae.com/works/protein-sculptures-angel-of-the-west/> (acedido a 13/02/2015)
- [25] R. Gonçalves-Maia, “Dos Raios-X à Estrutura Biomolecular: uma perspectiva histórica”, conferência integrada no programa “2014 Ano Internacional da Cristalografia”, org. FCT-NOVA, 2014.09.17

# VICENTE COELHO DE SEABRA

## FILÓSOFO AGRICULTOR E PATRIOTA

A.M. Amorim da Costa

Departamento de Química – Universidade de Coimbra – Portugal  
acosta@ci.uc.pt

**Vicente Coelho de Seabra, a devout patriot and philosopher in agriculture** – Born at Congonhas do Campo, Vila Rica, in Minas Gerais, Brazil, a Portuguese colony until 1822, Vicente Coelho de Seabra came to Coimbra, in 1783, to attend Natural Philosophy, Mathematics and Medicine in the reformed University by the Marquis of Pombal, which established the teaching of chemistry. Here, he has been one of the first students to graduate in Natural Philosophy, in 1787. Firstly, appointed demonstrator to the chair of chemistry, he published in the years 1787-1790 on Fermentation, Heat and Water, and a Textbook on chemistry, following Lavoisier's doctrine. As a form of recognition for his work, he was granted, in 1791, a doctorate and was appointed lecturer to the chair of Chemistry and Metallurgy and member of the Lisbon Royal Academy of Sciences. Very soon, he became substitute-lecturer to the chairs of botany and zoology and later substitute-professor of chemistry. As substitute-lecturer to the chairs of botany and zoology he involved very much and wrote on the development of portuguese agriculture, once considering himself as "a devout patriot and philosopher in agriculture". On celebrating his 250<sup>th</sup> birth's anniversary, our appreciation focus on his work on the agricultural matters.

Natural de Congonhas do Campo, em Minas Gerais, Brasil, Vicente Coelho de Seabra, foi um dos primeiros docentes de Química formado na Universidade de Coimbra depois da Reforma Pombalina de 1772. Seduzido pelas novas ideias químicas de Lavoisier, ele foi o primeiro a divulgá-las, por escrito, em Portugal. Porém, só já ao longo do século XX tiveram justo reconhecimento. Tendo morrido muito cedo, para além de demonstrador de Química por vários anos, foi ainda durante muitos outros Lente Substituto de Metalurgia, Zoologia e Botânica, empenhando-se incansavelmente por diversos e variados estudos ligados com o desenvolvimento da Agricultura em Portugal, chegando a apresentar-se como "filósofo agricultor e patriota". Celebraram-se agora os 250 anos do seu nascimento. No quadro das celebrações havidas, apraz-nos evocar aqui esta faceta da sua actividade, muito mais ignorada que a sua actividade como químico.

### 1. UMA VIDA CURTA, DE GRANDE TRABALHO E APARENTE ESQUECIMENTO CIENTÍFICO

Vicente Coelho Seabra da Silva e Telles, abreviadamente conhecido por Vicente Coelho de Seabra ou, simplesmente, Vicente de Seabra, nasceu em 1764, em Congonhas do Campo, Vila Rica, no Estado de Minas Gerais, Brasil, filho de Manuel Coelho Rodrigues, alferes, e Josefa de Ávila de Figueiredo, onde eram senhores das fazendas dos *Sandes*, *Antonio Dias* e do *Caldeirão* [1]. Estudou no Seminário de Nossa Senhora da Boa Morte, na cidade de Mariana, em Minas Gerais, onde foi aluno de um notável professor de Filosofia Natural, o Cónego Luis Vieira da Silva. Terminados os estudos secundários no Brasil, veio para Coimbra, onde se matriculou, no ano de 1783, no curso da Faculdade de Filosofia Natural criado pela Reforma Pombalina da Universidade, em 1772. Nela obteve o grau de Bacharel em Filosofia e Matemática em 1787. Obtido este grau, continuou os seus estudos na Faculdade de Medicina, em que se matriculara ainda em 1786, e onde se graduou como bacharel, em 1790. Por carta régia de 24 de Janeiro de 1791, foi dispensado de fazer exame privado e, foi doutorado graciosamente em Filosofia Natural. Neste mesmo ano foi nomeado demonstrador de Química. Sócio livre da Academia Real das Ciências de Lisboa desde o ano em que obtivera o grau de Bacharel em Filosofia Natural, em 1789 foi admitido como sócio correspondente da mesma da qual

se tornaria sócio efectivo em 1798. Em 1795, foi nomeado Lente substituto de Metalurgia, Zoologia e Botânica.

No dizer do autor da *Memória Histórica da Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra* escrita em 1882, no quadro das celebrações do primeiro centenário da Reforma Pombalina, Vicente de Seabra era de "compleição pouco robusta, mas dotado de tenaz e imoderada aplicação ao estudo. A sua saúde bem depressa se arruinou, falecendo em Março de 1804, antes de completar 40 anos de idade. Se a sua vida foi curta, ao menos deixou importantes trabalhos que a enobrecem. Ainda ao tempo de estudante publicou um livro de perto de 500 páginas, impresso em Coimbra, nos anos de 1788 e 1790, com o título de *Elementos de Chimica*. Em atenção à época em que foi escrito, e aos verdes anos do autor, tem esta obra incontestável merecimento" [2].

Dessa curta vida, sabemos que depois de graduado em Medicina, ao mesmo tempo que trabalhava na Universidade como demonstrador de Química, exerceu actividade médica, como se deduz de carta por ele dirigida ao Abade Correia da Serra da Academia Real de Ciência de Lisboa escusando-se a aceitar a incumbência de uma viagem de estudo imediata no País que a Academia lhe solicitava; como razão para a sua escusa refere precisamente o facto de a praxe médica a que se dedicara bastante nesse ano o ter prendido muito, tornando-lhe absolutamente impraticá-

vel o poder participar em viagens [3]. E sabemos também que casou, em Coimbra, com D. Francisca Pimentel e teve mais que um filho, pois numa outra carta dirigida também ao Abade Correia da Serra refere estar em Formoselha, perto de Coimbra, a “curar os seus filhos que epidemicamente adoeceram de bexigas” [4]. E sabe-se ainda que um destes filhos, Francisco de Paula Coelho Seabra, se veio a fixar no Brasil onde casou com uma filha de Raimundo Lobo Leite Pereira e residiu em Santo António do Rio Bonito, no Estado do Rio de Janeiro e teve uma filha, Augusta de Seabra [5].

Da obra de Vicente Seabra como cientista e membro do corpo docente da Universidade de Coimbra sabemos bem mais que a breve informação dada por Joaquim Augusto Simões da Carvalho na acima citada *Memória Histórica da Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra*. Estão devidamente referenciados os vários escritos de sua autoria, o propósito e a motivação que os ditou.

No *Discurso Preliminar* dos seus *Elementos de Chimica*, o próprio Vicente Seabra diz que o grande objectivo por ele visado ao escrever este manual de química era “suprir a falta que havia em Portugal e suas Conquistas de um bom compêndio de química” e que “o fez no cumprimento de uma tarefa que reconhecia como difícilíssima por sua natureza, superior às suas forças, e realizada de modo interpolado e apressado, no limitado tempo vago das aulas que ainda frequentava como aluno na Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra”, observando também que o fazia “estando persuadido que esta sua obra poderia não vir a ter a aceitação merecida, por variadas razões, nomeadamente, o facto de os verdes anos do autor darem azo para o acusarem de inexperiente” [6].

E na *Dedicatória* que faz da mesma obra à Sociedade Literária do Rio de Janeiro, “huma Corporação de Patriotas illuminados”, “para o uso do seu curso de Chimica” acrescenta: “sem hum bom Compendio de Chimica que apresente à mocidade com ordem as idéas de huma theoria luminosa, de balde se amontoaõ experiencias sem nexo, e sem destino fixo. O espírito embaraçado não dá passo; ou se avança, he por entre espinhos e precipícios. A parte pratica desta tão útil Sciencia, allumiada pela tocha das verdades theoréticas, e dirigida por hum ajuizado sistema, vós bem sabeis, quanto intereça à humanidade aperfeiçoando a Agricultura, o Comercio, e as Artes, que tão atrasadas estão em o nosso Brasil. Sem Agricultura nenhuma sociedade politica, nenhuma riqueza, ou prosperidade nacional. A nação, que depende de alimentos estrangeiros he huma nação de escravos. “Sem o Comercio, a Agricultura enlanguce, as terras se cobrem de mato; e a falta de dinheiro proveniente da falta de extracção e consumo dos géneros diminua a reproducção annual. Sem Arte, as matérias brutas não recebem forma: os géneros da agricultura não alcançaõ o valor preciso; e o Comercio vem a perder na balança geral: a indolência ganha pés; e a miséria do povo se augmenta de dia em dia” [7].

Sistematizando, podemos distribuir os escritos científicos de Vicente Seabra por três períodos distintos e separados.

Num *primeiro* período, correspondente aos anos finais do seu curso de Filosofia Natural e primeiros de Demonstrador de química, ~1786 a 1790, os anos votados a escritos sobre matérias estritamente do foro químico, a *Dissertação sobre a Fermentação Geral e suas species*, dedicada ao Moço Fidalgo da Casa de sua Magestade, o capitão de cavalaria de Minas Gerais, o Snr. Joze de Vasconcellos Parada e Soiza, em 1787 [8]; a *Dissertação sobre o Calor* (1788), dedicada ao senhor José Bonifácio de Andrade e Silva [9] e os *Elementos de Chimica* dedicados à Sociedade Literária do Rio de Janeiro [10]. Estes incluem a sua *Dissertação sobre as Agoas Mineræes* [11].

Num *segundo* período, os anos de toda a década de 1790 com finalização nos primeiros anos de 1800, os anos votados a assuntos inteiramente ligados à Agricultura, a *Memória sobre a Cultura do Rícino ou Mamoã em Portugal e manufactura do seu óleo* (1791) [12], a *Memória sobre o Método de Curar a Ferrugem das Oliveiras* (1792) [13], a *Memória sobre a Cultura das Videiras e Manufactura dos Vinhos* (1799) [14], a *Memória em que se dá notícia das diversas espécies de Abelhas que dão Mel, próprias do Brasil e desconhecidas na Europa* (1799) [15], a *Memória sobre a Cultura do Arroz em Portugal e suas Conquistas* (1800) [16] e a *História e Cura das Enfermidades mais usuas do Boi, e do Cavalo* (1802) [17] tradução que fez do livro de Francisco Toggia, *Storia e cure delle piú familiari malattie del’buoi analoghe a quelle del cavallo*, publicada, em Turim, Itália, nos anos de 1783-1784.

Num *terceiro* período, os anos finais da sua vida, com o regresso a assuntos do foro estritamente químico, a *Memoria sobre os Prejuizos causados pelas Sepulturas dos cadáveres nos Templos e Methodo de os prevenir* (1800) [18] e a *Nomenclatura Chimica Portuguesa, Franceza e Latina a que se junta o Systema de Caracteres Chemicos adaptados a esta Nomenclatura por Haffenfratz e Adet* (1801), oferecida a S. Alteza Real, o Príncipe Regente N.S. [19].

Com excepção da *Memória sobre o Método de Curar a Ferrugem das Oliveiras* e a *Memória sobre a Cultura das Videiras e Manufactura dos Vinhos*, os escritos científicos de Vicente Seabra não tiveram reconhecida aceitação em vida do seu autor. Só muitos anos depois da sua morte tal veio a acontecer. O *Jornal Encyclopédico*, no mesmo número em que noticiou a tradução espanhola do *Methodo de Nomenclature Chimique*, em Junho de 1788, na secção dedicada a Bibliografia, fez a recensão da *Dissertação sobre a Fermentação em geral, e suas Espécies*, em termos pouco elogiosos. Referido o conteúdo da *Dissertação* em apreço, o autor da recensão escreveu: “em toda esta Dissertação não encontramos nada de novo, e ousamos afirmar que he quasi huma mera tradução, ou resumo do que sobre o assumpto diz *Mr Fourcroy*”. Mesmo assim, o autor da recensão recomenda a leitura da Obra, “pelas coisas interessantes que contém, e sobretudo pelas experiências, que trás acerca do Ether, feitas pelo author com muito cuidado e tino; as quaes fazem esperar que poderá algum dia dar à luz composições mais perfectas e vir a ser com o tempo, assídua applicação e repetidas experiências, hum excelente químico”. Mas critica duramente a terminologia que

a Obra utiliza: “assim ele se esmerasse mais na adopção dos termos, e não introduzisse em tão pequena obra tantos vocábulos bárbaros, como por exemplo, *acidez, acidificante, averdongada, alongada, cretosos, estrias, filamentos, glúten, imiscível, lactênsia, lactescente, mucosidade, putrefacção, pútrida, retrogredir, robur, ficidez, tartaroso e outros muitos*” [20].

Alguns anos depois, em 1800, como Lente Substituto de Botânica, quer como o docente mais familiarizado com o tema “fermentação”, já por quanto sobre ela escrevera na sua *Dissertação* de 1787, e no seu Manual *Elementos de Chimica* (§§ 361-369), foi Vicente de Seabra escolhido para examinar uma dissertação proposta pelo Lente de Botânica da Faculdade de Filosofia, Felix Avelar Brotero, a um dos seus alunos, intitulada “*omnis germinatio vera est fermentatio*”. Não concordando que em todo e qualquer processo de germinação haja necessariamente uma fermentação, Seabra rejeitou a dissertação proposta por Brotero ao seu aluno e entrou em conflito aberto com ele. O conflito agudizou-se, com queixa epistolar de Seabra ao Ministro de Estado D. Rodrigo de Sousa Coutinho, acusando Brotero de o ter ofendido gravemente e aos seus colegas, “publica e escandalosamente”, de “o ter arguido de ignorância científica”. A inimizade ficou para o resto de toda a sua vida. Tendo em conta a posição e prestígio de Avelar Brotero dentro da Faculdade e além fronteiras, o maior prejudicado na sua imagem científica foi Vicente de Seabra [21-23].

Mais: embora o texto do seu Manual *Elementos de Chimica* tenha sido submetido à Congregação da Faculdade de Filosofia para apreciação e só depois de aprovado por ela na sua reunião de 21 de Dezembro de 1787, ter sido publicado pela Imprensa da Universidade, nunca foi tido como Manual para ser adoptado e utilizado oficialmente no curso de química da mesma Faculdade, talvez porque o autor o tenha oferecido à Sociedade Literária do Rio de Janeiro para o uso do curso de química desta, que nunca chegou a funcionar. Nem sequer foi considerado nunca como um dos manuais possíveis no elenco dos então considerados para o efeito, quando a Faculdade teve de adoptar um, por imperiosa ordem da Rainha, após a jubilação de Domingos Vandelli, em 1791, enquanto o novo Lente de Química, o Dr. Thomé Rodrigues Sobral, encarregado da sua feitura o não tivesse feito [24,25]. E também não deixa de ser sintomático o que se passou com a tradução e publicação do artigo *Affinité* da autoria do barão de Morveau, no Dicionário de química da *Encyclopédie Méthodique*. Na Congregação da Faculdade de Filosofia havida em Julho de 1791, o Director da Faculdade, o doutor António Soares Barbosa propôs que se encarregasse dessa tradução e publicação o doutor Luiz António de S. Payo. Tendo o Reitor discordado desta proposta, foi aprovado que dela se encarregaria o demonstrador da cadeira de química, o Doutor Vicente Coelho de Seabra. Sem se saber porquê nem como, dois anos depois, em 1793, aparece publicado pela Real Imprensa da Universidade o *Tractado das Affinidades Chimicas*, tradução daquele artigo, com introdução do Doutor Thomé Rodrigues Sobral e por ele mesmo traduzido. Vicente Seabra fora ultrapassado no processo [26].

E quando Vicente de Seabra publicou a sua *Nomenclatura Chimica Portuguesa, Franceza e Latina a que se junta o Systema de Caracteres Chemicos adaptados a esta Nomenclatura por Haffenfratz e Adet*, em 1801, a Faculdade de Filosofia parece tê-la ignorado completamente. Só em 1816, mais de uma dezena de anos após a morte de Vicente Seabra, encontramos uma referência de Thomé Rodrigues Sobral no seu trabalho “*Sobre os Trabalhos em grande que no Laboratório Chimico da Universidade poderão praticar-se*” [27] ao apresentar o Catálogo dum grande número de produtos químicos, nomeados de acordo com a nomenclatura química de Lavoisier e ordenados por ordem alfabética em nota de rodapé, a propósito de alguns dos produtos desse Catálogo, deixa adivinhar que a Faculdade ainda não adoptara regras que servissem para acabar o mais possível com as querelas que continuavam a propósito da nomenclatura química que se deveria adoptar. Para o efeito ele próprio se propôs elaborar uma Memória de sua autoria sobre a nomenclatura química a usar, depois da racionalização que dela fizera Lavoisier, estabelecendo regras que permitissem deixar de vez a linguagem usada pelos iatroquímicos e flogistas que na sua falta de sistematização tornava difícil o estudo da extensa matéria da ciência química pelo filósofo nela interessado, com “um tempo de vida por demais curto para decorar tantos e tantos nomes insignificativos”. Cumpriu com o então se propunha: a Memória que elaborou para o efeito foi apresentada e apreciada na Congregação da Faculdade de Filosofia havida a 29 de Julho de 1824, tendo a mesma sido “aprovada unanimemente pelo Conselho” e resolvido pelo mesmo “que servisse para uso da respectiva aula” e “dispensando-se ao autor os maiores elogios e agradecimentos por este importante trabalho”. Mais uma vez, o trabalho de Vicente de Seabra sobre o assunto não parece ter merecido a atenção que talvez devesse.

Foi preciso esperar até meados de século XIX para encontrar algumas referências à obra e figura de Vicente Coelho de Seabra, primeiro pela pena do seu compatriota F. A. De Varnhagen, em 1847 [28], depois pelo já mencionado Joaquim Augusto Simões de Carvalho, em 1872, na *Memória Histórica da Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra*, referindo-se com muito apreço aos trabalhos de Vicente Seabra, que rotulou de importantes trabalhos por ele realizados que “muito enobrecem a obra” que deixou, com uma referência explícita ao “livro de perto de 500 páginas, impresso em Coimbra, nos anos de 1788 e 1790, com o título de *Elementos de Chimica*” que – diz – “em atenção à época em que foi escrito, e aos verdes anos do autor, tem esta obra incontestável merecimento”. E foi preciso esperar, sobretudo, pela segunda parte do séc. XX, para que tenha havido um interesse cada vez maior pela sua figura e sua obra. Considerado um “químico esclarecido luso-brasileiro” [29], tem sido relevado o seu papel na implementação da química de Lavoisier em Portugal [30-32], realçado o valor dos seus trabalhos sobre o Calor e Fogo, com textos que podem ser considerados fundadores da termodinâmica em português [33-34], o grande interesse dos seus estudos sobre as afinidades químicas [35] e outros mais.

## 2. DO MODO DE TRATAR A FERRUGEM DAS OLIVEIRAS AO MODO DE CULTIVAR O ARROZ

“Sem huma theoria luminosa, de balde se amontoão experiencias sem nexo, e sem destino fixo. O espírito embaraçado não dá passo; ou se avança, he por entre espinhos e precipícios. A parte pratica desta tão útil Sciencia, a chimica, allumiada pela tocha das verdades theoréticas, e dirigida por hum ajuizado sistema, vós bem sabeis, quanto intereça à humanidade aperfeiçoando a Agricultura, o Comercio, e as Artes, que tão atrasadas estão em o nosso Paiz” [36]. Este princípio que deve orientar toda a prática da ciência que Vicente Seabra fez questão de deixar bem claro no *Discurso Preliminar* do seu Manual *Elementos de Chimica*, enquadra-se com todo o rigor no grande objectivo orientador que o Marquês de Pombal deixara bem claro em relação a todas as cadeiras do curso de Filosofia Natural: as lições teóricas de qualquer ciência não podem ser bem compreendidas e de pouco aproveitam sem a prática delas; o adiantamento e progresso não enriquece com sistemas vãos e especulações ociosas mas com descobrimentos reais, que não se acham de outro modo senão observando, experimentando e trabalhando.

A fundação da Academia Real das Ciências de Lisboa, em 1779, realçara esse mesmo objectivo apontado à cultura e prática das Ciências: “*Nisi utile est quod facimus, stulta est gloria* – “se não for útil o que fizermos, é vã toda a glória que daí advenha”. E a Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra estava em estrita comunhão com a acção desta Academia. Os membros de ambas as instituições, muitos deles activos numa e noutra, estavam visivelmente empenhados no real desenvolvimento e progresso da Agricultura, do Comércio e das Artes em geral, dominados por “incontível mostra de zelo e amor ao seu Paiz”. Vicente Coelho de Seabra foi disso uma prova clara.

Ao celebrarmos os 250 anos do seu nascimento, evocando a sua acção como cientista e docente universitário, queremos fazê-lo examinando, em particular, os seus escritos no domínio da agricultura, evocando-o, como “filósofo agricultor e patriota”, como ele se auto-intitulou num dos seus escritos.

### 2.1 MEMÓRIA SOBRE O MÉTODO DE CURAR A FERRUGEM DAS OLIVEIRAS

A viver em Coimbra desde 1772, para onde viera, a convite do Marquês de Pombal para ocupar o lugar de Lente proprietário da Cadeira de Física e dirigir o Laboratório da mesma cadeira, na Faculdade de Filosofia da reformada Universidade, “chocado” com o estado deplorável a que estava reduzida a cultura da azeitona “neste Território de Coimbra”, e, de modo geral, a produção do azeite em Portugal, o italiano João António Dalla Bella (c. 1730-1823) apresentou, em 1783, na Academia de Ciências de Lisboa um estudo sobre a manufactura do azeite que a Academia logo mandou imprimir e divulgar. Foi impresso no ano seguinte sob o título *Observações sobre o modo de aperfeiçoar a manufactura do azeite de oliveira em Portugal* [37].

No prefácio, observa, nomeadamente, que o azeite fabricado neste Reino é de qualidade muito inferior ao que se prepara na Provença e na Itália pelo descuido de se não examinarem com diligência os preceitos recolhidos por uma longa experiência precedente que deixaram os antigos Gregos e Romanos sobre as regras que se devem observar na preparação de tão precioso licor. Por tais razões, está a sua produção reduzida, em Portugal, a um estado tão deplorável que se deixa perder uma grande cópia da mesma que com grande facilidade se poderia aproveitar, e reduz o azeite obtido a uma qualidade muito inferior á do que se prepara nos climas mais frios, e por consequência, menos favoráveis (Prefácio, pp.x-xi)<sup>1</sup>.

Em longa exposição de 130 páginas, num tratado distribuído por quatro partes distintas, com vários capítulos cada, Dalla Bella discorre com pormenor sobre a colheita das azeitonas (Pt.I), a conservação das mesmas (Pt.II), o método a praticar para fazer o azeite perfeito (Pt.III) e o método para bem conservar o azeite fabricado (Pt. IV).

Como é óbvio, para se obter um bom azeite impunha-se começar por ter boas oliveiras que produzissem, e com grande abundância, os melhores frutos possíveis.

Consciente disso e para que se caminhasse nesse sentido, Dalla Bella publicou, dois anos depois, uma outra Memória, agora dedicada à própria cultura das oliveiras, intitulada *Memoria sobre a cultura das oliveiras em Portugal oferecida a sua alteza real o serenissimo principe do Brasil* [38]. Nas três primeiras Partes desta, debruçou-se com grande pormenor, sobre a propagação, a plantação e cuidados a ter com as oliveiras até à frutificação, tratando, em seguida, numa Parte IV, daquilo que chamou o governo das mesmas. Aqui, dedicou todo um capítulo, o capítulo III, às várias doenças que afectam habitualmente as oliveiras, nas diversas regiões do nosso país, com grandes prejuízos, referindo também os remédios a usar para as debelar. No elenco dessas doenças referia a ferrugem e a sarna, e, sobretudo, as doenças devidas a toda uma série de parasitas, musgos, heras, toda uma série de “bichos que se alimentam do suco da azeitona”. Demoradamente, as suas observações iam directamente para estes parasitas e bichos (Pt. IV, cp. III, pp.99-109). A ferrugem era apenas mencionada, sem qualquer descrição.

Ora, acontecia que esta doença grassava por esses anos, em grande escala, nos olivais portugueses, em várias zonas do país. Os primeiros casos haviam surgido na década de 1760, pelas bandas de Setúbal, de lá se tendo alastrado, por contágio, até à Estremadura, subindo daqui para as regiões da Beira Baixa e Beira Alta, até as zonas de Trás-os-Montes por acção dos ventos nestas direcções, nos fins da Primavera e princípios do Verão. O ritmo a que crescia, tornara-se já um verdadeiro flagelo para a cultura das oli-

<sup>1</sup> Ao analisar o conteúdo das diversas *Memórias* científicas que vamos considerar nas páginas seguintes, por razões de fluidez e concisão, optaremos por indicar no corpo do próprio texto, entre parêntesis, o local onde se encontra a citação que se faz, ou o conteúdo em referência.

veiras e uma praga que se impunha atalhar urgentemente, sob pena dos prejuízos causados deixarem prever que em menos de 60 anos, à proporção com que estavam a acontecer, nenhum azeite se conseguisse recolher dos olivais portugueses, a “não ser que fossem rapidamente curados, ou se alguns incidentes favoráveis, ainda que de pouca duração, nos não acudirem” nas palavras de Vicente Seabra, na Memória que viria a publicar sobre o assunto. O flagelo atingira tais proporções que a Academia de Ciências de Lisboa propôs “prêmios a quem achasse meios de remediar tão grandes estragos”.

Na sequência das referidas observações e memórias de Dalla Bella sobre a manufactura do azeite e a própria cultura das oliveiras, dentro da Faculdade de Filosofia da Universidade de Coimbra, de imediato, Domingos Vandelli e Vicente Coelho de Seabra, corresponderam ao desafio da Academia das Ciências de Lisboa, promovendo estudos directos sobre a ferrugem das oliveiras.

Sobre o assunto, Domingos Vandelli apresentou na Academia das Ciências de Lisboa, em 1789, uma comunicação com o título: *Memória sobre a ferrugem das oliveiras* [39].

Nesta, achando que era pouco a simples nomeação da ferrugem como uma das doenças das oliveiras por que se ficara J. A. Dalla Bella na sua *Memória* sobre a cultura das mesmas, e bem ciente do muito e grande prejuízo que esta doença causava aos olivais, e a facilidade com que a eles se comunicava, não só nos arredores de Lisboa, como também em Santarém, Torres Novas e em muitas outras partes do País, Domingos Vandelli tinha por absolutamente necessário que se observasse a causa de tal doença e se cuidasse no remédio para a atacar. Foi o que se propôs com esta sua *Memória*.

Quanto à causa, afirma Vandelli que “esta doença é produzida por um insecto que parece uma pequena lapa, semelhante àquele que produz a ferrugem das figueiras”, um insecto que lhe parecia pertencer ao género *Coccus* de Lineu, não obstante o macho por causa de suas asas lhe parecesse dever pertencer antes ao género *chermes* do mesmo Lineu, como descrito no tomo VII, p. 265 do *Cours d’Agriculture* do abade Rozier. “Este insecto se nutre - diz Vandelli - nos ramos novos e mais tenros da oliveira, dos quais passa às folhas, e nelas se demora até achar nutrimento, e depois retorna pelos mesmos ramos: cobrindo tanto as folhas, como os ramos de uma matéria preta, produzida ou do mesmo insecto, ou da transpiração morbosa da oliveira”, a que os lavradores chamam de ferrugem (p.8).

Nesta sua convicção, é imediato o remédio que refere: “o decotar das oliveiras foi até agora o único remédio; porém, ficam seis ou sete anos sem dar fruto”. Alternativamente, à semelhança do que se fazia com a ferrugem das figueiras e era defendido pelo seu colega do *Laboratório Chimico* da Universidade de Coimbra, o Doutor Manuel Dias Baptista, seria tirar as folhas carregadas dos insectos infectantes, muito antes de elas caírem por si, e queimá-las. Como? “varejando com força as oliveiras que têm ferrugem para

fazer-lhes cair o maior número de folhas possível, e cortar-lhes todos os ramos novos nos quais reside o insecto”. Este lhe “parecia ser o remédio o mais pronto e seguro, e menos prejudicial”. Sem mais considerações, concluiu: “não faltarão outros remédios que se poderão experimentar, e principalmente nos lugares onde há abundância de sal comum, ou de água salgada, com a qual por meio de apropriada bomba se poderiam lavar as oliveiras com ferrugem” (p.9).

Vê-se pelo seu teor que esta Memória de Vandelli foi elaborada sem grande tempo para discorrer demoradamente sobre o assunto.

Ao tempo em que foi preparada, no Laboratório Chimico em que D. Vandelli cumpria o seu último ano como Director, o Doutor Vicente Coelho de Seabra, médico e demonstrador de química, dedicava-se já a um extenso estudo do mesmo problema, com vastas e diversificadas experiências no terreno, cuja descrição pormenorizada resultaria na acima referida *Memória sobre o Methodo de Curar a Ferrugem das Oliveiras* [13], memória que apresentaria, no ano seguinte, na Academia Real das Ciências de Lisboa. Justificando o estudo, Vicente de Seabra refere – o que já acima dissemos – que o ritmo a que crescia, em Portugal, a terrível doença conhecida por ferrugem das oliveiras justificava plenamente que a Academia Real das Ciências de Lisboa tivesse proposto “prêmios a quem achasse meios de remediar tão grandes estragos”: “o prejuízo que nos tem causado a ferrugem das oliveiras em menos de 30 anos (é tal que), à proporção, daqui a 60 anos nenhum azeite recolheremos dos nossos olivais, se lhes não fizermos algum dos remédios que adiante ensinaremos, ou se alguns incidentes favoráveis, ainda que de pouca duração, nos não acudirem” (pp.4, 11).

Como “Filósofo Agricultor e patriota”, aceitou o Programa da Academia sobre o assunto. Lançou-se às experiências necessárias que julgou mais apropriadas ao fim desejado, estudando meticulosamente (i) a Epocha desta enfermidade das oliveiras em Portugal (Pt. I, pp.7-10); (ii) o insecto que a causa, desde a sua desovação e desenvolvimento até ao estado de perfeição, mostrando como durante este o seu desenvolvimento causa a esterilidade das oliveiras (Pt. II. pp.10-22); (iv) os meios de remediar este mal (Pt, III, pp.22-51).

Os estudos que encetou no cumprimento do programa que se propôs, levaram-no a concluir:

- (i) As oliveiras afectadas tornam-se denegridas; as suas vergõntes com um ou dois anos, muito raramente as com três ou mais anos, e as suas folhas, principalmente na página superior, ficam cobertas de uma como cõdea de pó negro que as torna estéreis, e alguma azeitona que produzem “he mal vingada, e tem muito pouco azeite” (pp.8-9).
- (ii) O insecto responsável por esta cõdea de pó negro designa-o ele por *coccus da oliveira*, considerando-o uma espécie diferente do *coccus* que haviam referido Ro-

zier e Domingos Vandelli. A sua desovação começa em Agosto e vai até finais de Setembro; os ovos parecem um pó subtil só perceptíveis como entidades individuais com a ajuda de uma boa lente; alimentam-se das vergôntas tenras, apenas com um ou dois anos, algumas já com três anos. Os insectos começam a desenvolver-se do ovo na Primavera. No caso do inverno ser relativamente quente, o desenvolvimento pode começar em Janeiro, como pôde observar acontecer em Montemor-o-Velho, em 1791, dado o inverno de 1790/91 ter sido relativamente quente. Desde que nascem até ao estado do seu maior crescimento são assaz vorazes.

A esterilidade das oliveiras resultante da ferrugem criada por estes insectos deve-se quer à deficiência de seiva que eles sugam, quer às dificuldades que a côlea de pó formada cria à absorção através das folhas dos princípios nutritivos de que a planta necessita, e o obstáculo que a mesma constitui à normal expiração (pp.20-21).

- (iii) Passando à análise dos tratamentos que se devem fazer para debelar esta ferrugem, Vicente de Seabra tem por inadequados todos aqueles tratamentos a que os lavradores de então habitualmente recorriam: a defumação com vapores de enxofre ou fumo de tabaco, o borrifar e o regar as oliveiras com água salgada, o recurso a incisões nas raízes, no tronco ou nos ramos da oliveira, introduzindo através delas, preparações de mercúrio ou de azeite de zimbro. A razão que aduz para esta sua tomada de posição é uma só: ele próprio experimentou esses tratamentos em olivais, uns da sua família, outros de vizinhos, sítios na encosta da Ribeira de Coselhas, na parte norte de Coimbra, e verificou que não resultavam de todo, ou no mínimo, o efeito procurado não era duradouro (pp.23-25).

Face à ineficácia dos tratamentos a que os lavradores recorriam, ele próprio se propôs procurar um que fosse mais eficaz na eliminação dos insectos infestantes e, simultaneamente, mais duradouro (p.29).

Experimentou o lançar fogo às oliveiras infestadas, chamuscando-as controladamente e no tempo apropriado, em Março, Abril e princípios de Maio. Fez a experiência, às escondidas, “numas oliveiras que eram propriedade do seu sogro, bem cheias de ferrugem” (p.31). Feitas as contas ao tempo gasto pelos operários envolvidos na operação, a carqueija gasta para a chamusca e o tempo que as oliveiras chamuscadas ficavam sem produzir (aproximadamente um a dois anos), achou que era este um método altamente eficaz e economicamente rentável, pelo que o recomendava muito. Decidido por ele, indicou com todo o pormenor como deveria ser aplicado (pp.34-40). Da sua lavra e engenho, propôs um dispositivo para proceder eficazmente e com facilidade ao chamusco das oliveiras invadidas pelos insectos infestantes, um forçado que ele próprio delineou ao pormenor, mostrando o seu desenho.

Este era para ele o método mais eficaz e económico para eliminar a praga da ferrugem; os mencionados métodos que os lavradores usavam, aqueles que começou por debater pela sua pouca eficácia, mais não seriam que “remédios de segunda classe”.

Em alternativa à chamuscação das oliveiras infestadas, mantendo pelo fogo os insectos infestantes e eliminando radicalmente os ramos e as folhas infestadas, outro método lhe parecia poder ser usado com eficácia e utilidade bastantes, a decotação dos ramos anuais e bienais, com as folhas que neles existissem. Quer dizer, em vez de queimar, proceder-se-ia ao corte dos ramos e das folhas infestadas (pp.41ss). A utilizar-se este método, a operação deveria ser feita, como no caso da chamuscação, em Março, Abril, princípios de Maio. Cada homem poderia decotar muito à vontade seis oliveiras por dia, usando instrumento apropriado, como aquele que ele próprio engendrou para o efeito e cuja descrição apresenta com todo o pormenor. Diz tratar-se de um método também económico, e as oliveiras decotadas começam a produzir com grande vigor, pouco mais de um ano depois.

Tendo a *chamuscação* e a *decotação* como dois meios únicos, seguros e vantajosos para curar a ferrugem das oliveiras, “os mais eficacíssimos e sumamente cómodos”, “simplicíssimos e fáclimos”, Vicente Seabra conclui: “os Agricultores poderão lançar mão ora de hum, ora de outro conforme a melhor economia que lhes fizer e segundo as circunstâncias do terreno em que se acharem as oliveiras” (p.46).

Mostrando e provando bem todo o interesse, entusiasmo e persistência no seu trabalho realizado, termina esta sua *Memória* dizendo: “estas minhas observações, são o resultado de quatro anos de trabalho nesta matéria” (p.46).

## 2.2 A CULTURA DO RÍCINO OU MAMOA, A CULTURA DAS VIDEIRAS E MANUFACTURA DOS VINHOS E A CULTURA DO ARROZ

Se a *Memória* de Vicente Coelho de Seabra sobre a ferrugem das oliveiras é prova bastante do grande interesse que votava e nutria pelos problemas da agricultura e do empenho que punha na sua resolução, outro tanto ressalta das suas memórias a *cultura do Rícino ou Mamoa*, a *cultura das videiras e manufactura dos vinhos*, a *cultura do arroz* e a *Memória sobre as diversas espécies de abelhas próprias do Brasil e desconhecidas na Europa*.

### 2.2.1 MEMÓRIA SOBRE A CULTURA DO RÍCINO OU MAMOA E MANUFACTURA DO SEU ÓLEO

Embora apresentada como publicada em 1792, a *Memória sobre a ferrugem das oliveiras* de Vicente Coelho de Seabra é anterior à sua *Memória sobre a cultura do Rícino em Portugal* que aparece como publicada em 1791, pois como ele próprio o diz, foi na sequência do trabalho que realizou sobre a ferrugem das oliveiras que se envolveu noutros trabalhos de interesse imediato para a agricultura, nomeadamente nos seus estudos sobre rícino. Escreve ele na sua *Memória sobre a Cultura do Rícino ou Mamoa em Portugal e manufactura do seu óleo* [12]: “entretanto, que eu procurava o remédio para o tão grave mal da ferrugem das oliveiras, lembrei-me de outro trabalho bem digno de ser empreendido; era ele achar o meio de suprir a falta de azeite de oliveira por outro, que quando não servisse para o

uso cibático, o suprisse ao menos nos outros usos económicos” (*loc cit.* pp.233-234). “Entre as plantas de cujo fruto se poderia tirar uma suficiente porção de óleo com grande vantagem, me lembrei de uma, que em Minas Gerais do Brasil somente faz lá necessário o azeite para o uso cibático, suprindo nos mais usos económicos, com igualdade, e muito maior comodidade no preço, como é notório de todos os mineiros” (p.234).

Estudou com todo o cuidado a cultura das *mamoneiras* e as vantagens que se poderiam tirar do seu uso, fazendo numerosas experiências, durante meses a fio, usando alguns espécimes que ainda existiam na cerca dos Bentos onde fora instalado o Jardim Botânico da Universidade de Coimbra, e também na quinta do excelentíssimo Bispo de Coimbra, em Formoselha. Compendiu as suas indagações nos seguintes resultados:

- 1.º A *mamoneira*, também conhecida por *cataputia maior*, *palma* ou *manus Christi*, *mirabilis arbor*, *carrapateiro*, *árvore do tártaro* ou *ricino comum* é uma árvore de porte médio, de tronco grosso, roliço e nodoso, que dá flores racemosas e apétalas, com caules penta-partidos nas flores masculinas e tri-partidos, nas flores femininas. Com uma textura assaz tenra, em qualquer das suas variedades, a *vermelha* e a *branca*, dá-se muito bem nos climas equatoriais e nos países temperados. Daí ser uma planta muito abundante em todo o Estado de Minas Gerais, no Brasil, desenvolvendo-se e frutificando igualmente bem, em Portugal, afora os meses de Novembro, Dezembro, Janeiro e Fevereiro;
- 2.º É uma planta que está formada ao fim do segundo ano após a plantação, e logo começa a produzir. Do terceiro ano por diante dá no decurso de oito meses, de Fevereiro a Outubro, dois a três alqueires de fruto ou semente. Nisto leva uma vantagem muito grande sobre as oliveiras que precisam de seis até dez anos para começarem a produzir bem. Produz optimamente assim nos terrenos altos, como baixos, barrentos ou pedregosos, altos ou baixos, húmidos, com alguma cousa arenentos, contanto não sejam faltos de humidade, e preferencialmente com boa exposição solar; todavia, o terreno mais apropriado é o barrento e pedregoso, ao mesmo tempo húmido e com alguma humidade;
- 3.º A estação mais própria para plantar as *mamoneiras*, em Portugal, é desde o princípio de Fevereiro até ao fim de Março, contanto o mês de Fevereiro não seja muito chuvoso. A plantação faz-se à laia da plantação da batata usando frutos bem escolhidos do ano anterior. Cada pé de *mamoneira*, do segundo ano em diante, produz com abundância, desde Março até ao fim de Outubro, um cacho, ou racimo terminal, de frutos capsulares, sub-ovados, de cor parda, sabor sob o doce, acre, com polpa branca e tenra. Quando bem maduros e secos, expostos ao sol, abrem-se e deixam cair com grande estrépito as sementes que contêm uma abundante porção de óleo fixo.
- 4.º O óleo existente nas sementes da *mamoneira* extrai-se ou por *expressão* ou por *cozimento*, depois de moídas,

da mesma forma que se extrai o azeite da azeitona. A colheita dos frutos da *mamoneira* e a extracção do óleo que contêm são, todavia, incomparavelmente “mais prontas, fáceis e suaves que as da azeitona” (§§14-15, 19; pp.240-241, 242-243), e a quantidade obtida por quantidades iguais de um e outro fruto, é maior no caso da *mamona* (§18). Para usos económicos, o óleo do *ricino* é igual ao do azeite; não devendo, todavia, ser utilizado para o uso cibático devido ao gosto nauseoso e à virtude purgativa que tem, donde a razão de se lhe dar o nome de *óleo tártaro* (§18. p.242).

E conclui: do que fica dito “se conhece claramente a grande utilidade que se pode tirar da cultura desta planta em Portugal, ainda mesmo quando não aparecesse a ferrugem das oliveiras” (§21, p.243)<sup>2</sup>.

## 2.2.2 AS VINHAS E O VINHO

A economia da vinha e do vinho sempre suscitou especial interesse entre os estudiosos portugueses, muito particularmente depois dos incentivos que o Marquês de Pombal, na segunda década do séc. XVIII, com a criação da Companhia Geral da Agricultura das Vinhas do Alto Douro, deu à exportação dos produtos vinícolas. Com quase dez anos de antecedência, a Academia Real das Ciências de Lisboa propôs, em 1781, a *Cultura das Vinhas* como o grande assunto de estudo para o ano de 1790. Em 1791, a Academia juntou, em publicação intitulada *Memórias de Agricultura premiadas pela Academia em 1790*, num só tomo, o Tomo II, a Memória que fora apresentada por Francisco Pereira Rebelo da Fonseca (pp. 1-273) com a Memória apresentada por Vicente Coelho Seabra da Silva Telles com o título «*Memória sobre a cultura das videiras e a manufactura dos vinhos*» [14]. Composta por 115 parágrafos e 37 extensas notas, esta ocupa mais de 196 páginas (pp.277-467), não incluídas as três páginas do índice. Referindo o seu conteúdo, anotaremos apenas:

“A Sábida Academia, sempre vigilante nos interesses do seu próprio país, propôs o seguinte Problema. *Qual he o methodo mais conveniente, e cautelas necessárias para a cultura das vinhas em Portugal; para a vindima, a extracção do mosto, conservação, bondade e fermentação do vinho, e para a melhor reputação, e vantagem deste importante ramo do nosso Commercio?* (Este é o) problema que pretendo resolver segundo as minhas forças, forcejando não pela glória vã de escrever, mas por ser útil aos meus semelhantes e à minha Patria” (Proemio, p.278).

E sumariza de imediato a matéria tratada nos cento e cinquenta e cinco parágrafos que constituem as cinco partes

<sup>2</sup> Impõe-se-nos observar aqui que o entusiasmo que Vicente Seabra pôs neste seu estudo e o entusiasmo com que defendeu a produção do óleo de *ricino*, em Portugal, como alternativa à produção do azeite das oliveiras não encontrou no país a aceitação que ele esperava. O facto de ser um óleo que não serve para o uso cibático, pese embora as suas aplicações médicas e industriais, justifica, porventura, o relativo fracasso da defesa com que o autor defendeu a cultura do *ricino* e a utilização do seu óleo, em Portugal.

desta sua Memória: “dividirei esta Memória em cinco partes: na primeira tratarei da Agricultura em geral (Parte I, pp.279-326); na segunda, da cultura das vinhas e suas enfermidades (Parte II, pp.327-382); na terceira, da vindima, extracção do mosto, fermentação, bondade e conservação do vinho, e como se fazem os melhores vinhos estrangeiros (Parte III, pp.383-420); na quarta, das enfermidades do vinho e suas falsificações, e os meios de conhecer tudo isto (Parte IV, pp.420-437); na quinta, em fim, dos vasos e adega” (Parte V, pp.438-452). Um programa extenso e praticamente completo que cumpriu com rigor, notável conhecimento e extraordinária erudição. Nele estão bem patentes os seus vastos conhecimentos no domínio da Filosofia Natural, particularmente no domínio da História Natural e da Química, forcejando não pela glória vã de escrever, mas por ser útil aos seus semelhantes e à sua Patria.

### 2.2.3 AS DIFERENTES ESPÉCIES DE ABELHAS EXISTENTES NO BRASIL E TAMBÉM A CULTURA DO ARROZ

Foi já como Médico (Bacharel em Medicina, em 1790) e como Doutor (doutorado graciosamente em 1791) e, sobretudo, como demonstrador de Química (1791-1795) e Lente substituto de Metalurgia, Zoologia e Botânica (1795-1801) e também como sócio da Academia Real das Ciências de Lisboa (sócio livre em 1789, correspondente em 1791 e efectivo em 1798) que Vicente Coelho de Seabra escreveu as suas duas últimas Memórias sobre assuntos agrícolas que aqui desejamos referir, a *Memória em que se dá notícia de diversas espécies de abelhas próprias do Brasil e desconhecidas na Europa* [15]; e a *Memória sobre a cultura do arroz em Portugal e suas Conquistas* [16].

Na primeira destas, sobressai, sobretudo, a faceta de Vicente Coelho de Seabra como Lente substituto de Zoologia, sem, todavia, perder de vista, quanto o seu saber e ofício podem e devem servir o comércio e a indústria do país. Como zoólogo, estudioso do reino animal, Seabra começa por referir a ordem e o género das abelhas então cultivadas em Portugal e quase toda a Europa, adentro do chamado *Systema Naturae* de Lineu, a ordem dos *hymnópteras*, e o género *Apis*, quais são as abelhas conhecidas como *abelhas bourdons*, as abelhas *maçonnes*, todas elas compreendidas debaixo do nome de *Abelhas Villageoises*, notando de imediato que a maior parte destas abelhas, para não dizer todas, são desconhecidas no Brasil (pp.99-100).

Depois desta referência de cariz inteiramente científico, cinge-se tão somente às abelhas existentes no Brasil que dão mel e também cera e que tem por desconhecidas na Europa. Em *Tabela Synodica* de sua autoria, classifica-as em três espécies: (i) as destituídas de acúleo e de qualquer humor caustico, quais são as abelhas *Urusú*, as abelhas *Mambucas*, as *Mandasaia*, as *Jataí*, as *Mendorim* e as *Bate-chapeo* (pp.100-101); (ii) as abelhas destituídas de acúleo mas que lançam um humor cáustico e até mordem, quais são as abelhas *Caga-fogo*, as *Jandaíra* e as *Tubiba* (pp.101 e 103); (iii) as abelhas com acúleos envenenados que atacam à maneira das vespas, quais são as *Marimbondo-vulgar* e as *Marimbondo-Inchú* (pp.101 e 103); e (iv)

as abelhas que mordem quais são as *Arapuá* (p.104). Nesta sua Memória, Vicente Coelho Seabra faz a descrição física de cada tipo das abelhas pertencentes às espécies catalogadas e refere onde fazem casa, os casulos: dentro dos troncos das árvores, umas; suspensos dos ramos das árvores, outras; nos buracos das paredes, etc. E descreve as características mais notórias do mel e da cera que cada espécie destas abelhas produz, bem como as quantidades médias de um e outro destes produtos.

### 2.2.4 A CULTURA DO ARROZ

Nos meados da década de noventa de mil e setecentos, a população de algumas localidades do baixo-Mondego, foi atingida por uma epidemia generalizada, manifesta em febres, mal-estar geral, tremuras, sezões, etc., cuja causa se não conseguia descobrir. Muitos a atribuíam à cultura do arroz. Nesta convicção, “hum dos mais respeitáveis Tribunais do nosso Reino” decidiu proibir a cultura deste cereal nos campos de Vila Nova de Anços da Comarca de Coimbra, junto a Soure. A situação criada logo levantou sérios protestos junto de muitos agricultores. Na Universidade de Coimbra, o Lente Substituto da cadeira de Botânica saiu prontamente a terreiro para dizer que se tratava de um grande erro que era imperioso combater. Para o efeito, preparou e fez publicar, em 1800, um opúsculo, na *Officina Literária do Arco do Cego*, em Lisboa, a referenciada *Memória sobre a cultura do Arroz em Portugal e suas Conquistas* [16]. Nesta, dedicou toda uma primeira parte à discussão “se a cultura do arroz é ou não nociva à saúde humana e causa de epidemias” (Pt. I. §§ I-XVIII, pp. 1-17). A discussão que apresenta começa por discutir se os vegetais, em geral, poderão causar epidemias, e quais as circunstâncias em que o poderão fazer, aplicando, de seguida, as considerações produzidas ao caso da cultura do arroz.

Evocando o “adiantamento dos conhecimentos da Filosofia Natural, e principalmente da Chimica” verificado nas últimas décadas, descreve com precisão o processo de fotossíntese que ocorre nas folhas verdes dos vegetais quando expostas aos raios do sol, em que o ar degenerado, o gás carbónico, alterado pelos animais no seu processo de respiração, e pelas muitas combustões, incluindo o processo de podridão dos corpos organizados, é convertido em ar puro. E daqui conclui: os vegetais viventes não somente não podem ser causa de epidemias, mas, pelo contrário, são o melhor preservativo delas. Em particular, o arroz, planta da família das grammas, aquelas plantas que mais absorvem o gás carbónico e mais exalam ar puro, por sua qualidade de planta, não é causa de epidemias (§§. XI-XII, pp. 8-11).

Se por sua qualidade de planta, o arroz não é causa de epidemias, que dizer da sua cultura? Mostrando ser bom conhecedor desta, Vicente Coelho de Seabra avança: como planta aquática, quando cultivado em água corrente, ou mesmo em águas estagnadas, enquanto vegeta, também não vicia a atmosfera; só nos pauis, onde com a sua cultura, apareçam, na primavera, imensos outros vegetais, vermes, insectos e peixes em podridão, que restam por todo o estio, aí sim, a sua cultura pode originar algumas epidemias, mas

não devidas especificamente, às plantas do arroz, mas de todo o conjunto. O que se deve evitar é, pois, as águas estagnadas nos locais onde a cultura do arroz se faz, e não a cultura do cereal (§§ XIII-XIV, pp. 10-12). A prová-lo, faz questão de referir que muitas das províncias da China, do México, do Brasil, do Perú, onde a cultura do arroz é muito vasta, são das mais populosas do mundo (§.XV, pp.13-15). Por conseguinte – conclui – “esta cultura não deve ser proibida; deve porem ser regulada; porque damno que pode causar não hé de o cultivar, mas sim do modo com que se cultiva” (§.XVII, p.17).

Uma vez mais, mostrando quão conhecedor era dos vários aspectos da cultura deste cereal, Vicente Coelho Seabra refere, na segunda parte desta sua *Memória*, com grande pormenor, o tempo e os terrenos em que ela deverá ser feita, em Portugal e suas Conquistas, e os cuidados a ter desde a preparação das sementes e dos terrenos, e como fazer a sementeira e a colheita (Pt. II, §§.XIX-XXXI, pp.17-29).

### 3. CONCLUSÃO

Terminaremos estas considerações sobre Vicente Coelho de Seabra como “filósofo agricultor e patriota”, reproduzindo aqui as palavras com que ele termina esta sua *Memória sobre a cultura do arroz em Portugal e suas Conquistas*: “cultivemos os terrenos, de todos os mais fecundos; cultivemos tão bem o arroz, como fica dito, e não haverá receio algum, e Portugal será mais fértil, que o duplo, e por conseguinte terá huma grande abundancia de géneros da primeira necessidade (...) e não patentaremos à Europa inteira os nossos poucos recursos” (§. XXX, pp. 26-27). Virá então, o tempo em que Portugal a par das grandes Nações da Europa, diga «eu existo, porque posso existir» (§. XXXI, p.28).

### REFERÊNCIAS

- [1] Vicente Coelho de Seabra, *Elementos de Chimica*, Coimbra, Real Officina da Universidade, Parte II, Tomo II (1790), p.244
- [2] Joaquim Augusto Simões de Carvalho, *Memória Histórica da Faculdade de Filosofia*, Coimbra, 1872, pp.298-299
- [3] Academia de Ciências de Lisboa, *Cartas inéditas de Vicente de Seabra ao Abade José Corrêa da Serra*, carta s/ data
- [4] *Idem*, também carta s/ data
- [5] Xavier da Veiga, *Efemérides Mineiras*, pp. 48-9, referido in Artur de Rezende, *Genealogia Mineira*, vol. II, Pt. II, p.24
- [6] Vicente Coelho de Seabra, *Elementos de Chimica*, Coimbra, Real Officina da Universidade, Tom. I (1788), Discurso Preliminar, pp VI-XII
- [7] Vicente Coelho de Seabra, *Elementos de Chimica*, Tomo I, loc. Cit., pp. IV-V
- [8] Vicente Coelho de Seabra *Dissertação sobre a Fermentação Geral e suas species*, Coimbra, Real Imprensa da Universidade, 1787
- [9] Vicente Coelho de Seabra *Dissertação sobre o Calor*, Coimbra, Real Officina da Universidade, 1788
- [10] Vicente Coelho de Seabra *Elementos de Chimica*, Coimbra, Real Officina da Universidade. Tomo I, 1788; Tomo II, 1790
- [11] Vicente Coelho de Seabra *Dissertação sobre as Agoas Mineiras* in *Elementos de Chimica*, loc. Cit., Tomo II, pp. 419-437
- [12] Vicente Coelho de Seabra, *Memória sobre a cultura do Rícino ou Mamoa em Portugal, e manufactura do seu óleo*, Lisboa, Academia Real das Ciências, 1791 in *Memórias Económicas da Academia Real das Ciências de Lisboa para adiantamento da Agricultura, das Artes e da Industria em Portugal e Suas Conquistas, 1789-1815* (Lisboa, Banco de Portugal, 1991) pp. 233-243
- [13] Vicente Coelho de Seabra Silva Telles, *Memória sobre o Methodo de Curar a Ferrugem das Oliveiras*, Coimbra, Real Imprensa da Universidade, 1792
- [14] Vicente Coelho de Seabra Silva e Telles, *Memória sobre a cultura das videiras e manufactura dos vinhos*” (Lisboa, Academia Real das Ciências, 1799) in vol. 2 das Memórias sobre agricultura premiadas pela Academia de Ciências (Lisboa, Academia das Ciências, 1799), vol.2, pp. 275-471
- [15] Vicente Coelho de Seabra, *Memoria em que se dá noticia de diversas espécies de abelhas próprias do Brasil e desconhecidas na Europa*” Lisboa, Academia Real das Ciências, 1799 in das Memórias de Matemática e Física, Lisboa, Academia das Ciências, 1799, Tomo II, pp.99-104
- [16] Vicente Coelho de Seabra da Silva Telles, *Memoria sobre a cultura do Arroz em Portugal e suas Conquistas*, Lisboa, Off. da Casa Litterária do Arco do Cego, 1800
- [17] Vicente Coelho de Seabra *Historia e Cura das Enfermidades mais usuas do Boi e do Cavalo* (Lisboa, Regia Officina Tipográfica, 1802, trad. da obra do italiano Francesco Toggia, *Storia e cura delle più familiari malattie del'buoi analoghe a quelle del cavallo*, publicada em Turim, Itália, nos anos de 1783-1784)
- [18] Vicente Coelho de Seabra, *Memoria sobre os Prejuizos causados pelas Sepulturas dos cadávares nos Templos e Methodo de os prevenir*, Lisboa, Officina Literária do Arco do Cego, 1800
- [19] Vicente Coelho de Seabra, *Nomenclatura Chimica Portugueseza, Franceza e latina a que se junta o Systema de Chaeacteres Chemicos adaptados a esta Nomenclatura por Haffenfrazt e Adet*, Lisboa, Typ. Chalcographica, Typoplastica e Literaria do Arco do Cego, 1801
- [20] *Jornal Encyclopédico*, Lisboa, Junho 1788, pp.244-245
- [21] Abilio Fernandes, *Rev. Fac. Ciencias Coimbra*, 14 (1945), 51-109
- [22] A.J. Andrade Gouveia, *Químico esclarecido Luso-brasileiro: Vicente de Seabra (1764-1804)* in *Memórias da Academia das Ciências de Lisboa*, Tom. XXI, Lisboa, 1976/77, pp.20-21
- [23] A.M. Amorim da Costa *Fermentation and germination – a scientific dispute in the later years of the eighteenth century between Vicente Seabra and Avelar Brotero* in 7<sup>th</sup> Intern. Conference on the History of Chemistry, Book of Abstracts (Sopron Hungary, ISBN 978-963-9319-96-7), p.23
- [24] A.M. Amorim da Costa, *Primórdios da Ciência Química em Portugal*, Biblioteca Breve, Instituto de Cultura e Língua Portuguesa, Lisboa, 1984, pp.57-61

- [25] A.J. Andrade Gouveia, *Químico esclarecido Luso-brasileiro: Vicente de Seabra (1764-1804)* in *Memórias da Academia das Ciências de Lisboa*, Tom. XXI, Lisboa, 1976/77, pp.22-26
- [26] A.M. Amorim da Costa, *Primórdios da Ciência Química em Portugal*, Biblioteca Breve, Instituto de Cultura e Língua Portugueses, Lisboa, 1984, pp.57-59
- [27] Thomé Rodrigues Sobral, *Sobre os Trabalhos em grande que no Laboratório Chimico da Universidade poderão praticar-se* in *Jornal de Coimbra*, vol. IX (1816), Pt. I, pp. 293-312)
- [28] F.A. Vernhagen, *Revista do Instituto Brasileiro e Geográfico do Brasil*, 9 (1847), pp.261-4.
- [29] A.J. Andrade Gouveia, *Químico esclarecido Luso-brasileiro: Vicente de Seabra (1764-1804)* in *Memórias da Academia das Ciências de Lisboa*, Tom. XXI, Lisboa, 1976/77, pp.20-21
- [30] A.J. Andrade Gouveia, *Vicente Seabra and the Chemical Revolution in Portugal*, in *Ambix*, 32 (1985), pp.97-109; Idem, *Vicente de Seabra e a Revolução química em Portugal* in *História e Desenvolvimento da Ciência em Portugal*, Publ. do II Centenário da Academia das Ciências de Lisboa, Vol. I (Lisboa, 1986), pp.335-352
- [31] Ana Carneiro, Maria Paula Diogo, Ana Simões, *Communicating the new chemistry in 18<sup>th</sup> century Portugal, Seabra's Elementos de Chimica* in *Science and Education*, 15 (2006), pp.671-692
- [32] Carlos A.L. Filgueiras, *Vicente Telles, o primeiro químico brasileiro* in *Química Nova*, n. 8. 1985, pp.263-270; Idem, *Vicente Seabra, o primeiro químico moderno no mundo lusófono* in *Actas do Simpósio Comemorativo dos 250 anos de Nascimento de Vicente Coelho de Seabra*, (Belo Horizonte, UFMG, 11-14 Nov. 2014 (in publ)
- [33] A.M. Amorim da Costa, *Da Natureza do Fogo e do calor na obra de Vicente de Seabra (1764-1804)* in *Universidade(s), História, Memória, Perspectivas* (Fac. Letras, Univ. Coimbra, 1991), vol.3, pp.137-145.
- [34] A.J. Andrade Gouveia, *Vicente de Seabra e a Revolução química em Portugal* in *História e Desenvolvimento da Ciência em Portugal*, Publ. do II Centenário da Academia das Ciências de Lisboa, Vol. I (Lisboa, 1986), pp.335-352
- [35] Fernando J. Luna, *Vicente Seabra Telles e a criação da nomenclatura em português para a Química 'Nova' de Lavoisier* in *Quím. Nova* vol. 36 (2013), pp.921-926
- [36] Vicente Coelho de Seabra, *Elementos de Chimica*, Tomo I, loc. Cit., pp. IV-V
- [37] João Antonio dalla Bella, *Observações sobre o modo de aperfeiçoar a manufactura do azeite de oliveira em Portugal*, Officina da Academia Real das Ciências de Lisboa, 1784
- [38] *Memoria sobre a cultura das oliveiras em Portugal offerecida a sua alteza real o serenissimo principe do Brasil* (Coimbra, Real Officina Typografica da Universidade, 1786). NB/-o impacto deste estudo de Dalla Bella nos anos que se lhe seguiram foi tal que ainda em 1818, passados que iam mais de trinta anos sobre de a sua primeira apresentação, Sebastião Francisco Mendo Trigo, procederia a uma segunda edição da Memória em causa, acrescentada com um apêndice da sua própria lavra, sob o título: João António dalla Bella, *Memoria sobre a cultura das oliveiras em Portugal, comentada por Sebastião Francisco Trigo* (Lisboa, Typ. Academia Real das Sciencias, 1818)
- [39] Domingos Vandelli, *Memória sobre a ferrugem das oliveiras*, in *Memórias Económicas da Academia Real das Sciencias de Lisboa, Tom. I*, (Lisboa, 1789), pp. 8-9, reprod. in Domingos Vandelli, *Aritmética Política, Economia e Finanças*, (Lisboa, Ed. Banco de Portugal, 1994), pp.97-98

**Alerts & Events**

**Videos & Webinars**

**ChemistryViews**

**News & Articles**

Join – register – benefit with 1,600,000+ visitors since launch!

Easy – fast – exciting updated every day for you and your work!

Spot your favorite content:

[www.ChemistryViews.org](http://www.ChemistryViews.org)

ChemPubSoc Europe

WILEY-VCH

## ESPELHO MEU, ESPELHO MEU...

A primeira percepção pictórica do *eu* terá acontecido quando algum nosso ancestral se viu reflectido na superfície da água. É a própria mitologia a sugeri-lo, contando-nos que Narciso, de tanto se admirar no espelho líquido de uma fonte, acabou por se apaixonar por si mesmo.

Os primeiros espelhos produzidos pelo Homem terão aparecido na Anatólia (Turquia) há uns oito milénios; consistiam em obsidiana polida (material vítreo de origem vulcânica que contém 70-75% de  $\text{SiO}_2$ , sendo o resto  $\text{MgO}$  e  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ). O corindo (uma das formas cristalinas do  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , com vestígios de ferro, titânio e crómio e com grau nove na escala de dureza de Mohs – o grau dez, o máximo, é atribuído ao diamante) terá sido um dos materiais utilizados para o polimento da obsidiana.



Obsidiana

Com o posterior desenvolvimento da técnica de extracção do cobre dos seus minérios e, mais tarde, da obtenção de bronze e de outras ligas, os metais passaram a ser usados no fabrico de espelhos, dos quais hoje se conhecem exemplares de cobre produzidos há 6000 anos nas regiões do vale do Tigre e do Eufrates, a sul da Mesopotâmia (actualmente Iraque). Posteriormente, o ouro e a prata foram igualmente usados na manufactura de espelhos, mais comumente para os folhear, aumentando a sua reflectância. A grande limitação destes espelhos era o facto de os fenómenos de oxidação atmosférica e de abrasão, aos poucos, os tornarem pouco fidedignos da realidade que reflectiam (a única excepção quanto à oxidação residia nos espelhos de ouro por este ser um metal demasiado inerte para escurecer por exposição ao ar). Uns dois milénios antes de Cristo os espelhos já eram mais ou menos utilizados em todas as regiões do globo onde se tivessem estabelecido sociedades com algum nível de civilização [1].

No Império Romano o fabrico de vidro e o uso deste estavam amplamente disseminados. Contudo, apesar das técnicas sofisticadas de que à época dispunham, os romanos não terão conseguido obter mais do que uns pequenos e grosseiros espelhos feitos à base de vidro e de chumbo. Com a queda do Império, a capacidade de produção no Ocidente de vidro transparente de boa qualidade decresceu acentuadamente.

Na Europa do século XIV, com uma indústria vidreira que lentamente recuperava dos reveses do passado, surgiram os espelhos convexos de vidro [2]. No célebre quadro de Jan van Eyck *Retrato de Casamento do Casal Arnolfini*, de 1434, aparece precisamente um desses espelhos em posição central, reflectindo toda a cena doméstica.



*Retrato de Casamento do Casal Arnolfini* (1434), Jan van Eyck (National Gallery, Londres)

A produção de espelhos era cara e laboriosa: um dos problemas era a areia usada no fabrico do vidro conter demasiadas impurezas para dela se poder obter um material límpido; para tornar tudo ainda mais complicado, era habitual o vidro estalar quando sobre ele se vertia o metal líquido.

Em Florença, na Renascença, foi inventado um processo de aplicação de chumbo a baixa temperatura sobre o vidro mas acabaram por ser os Venezianos de Murano, mestres ímpares na indústria vidreira, que criaram aqueles que podemos considerar os primeiros espelhos modernos. Para o efeito foi desenvolvida uma técnica que requeria a manipulação de largas quantidades de mercúrio líquido. Justamente da escola Veneziana, ficou-nos desse tempo uma das obras máximas da pintura europeia, a *Vénus ao Espelho* de Ticiano (ca. 1555), tela que retrata a esposa de Vulcano (o aleijado deus dos metais, do fogo e da metalurgia) olhando-se no espelho que Cupido – fruto de uma relação extraconjugal com Marte – lhe segura.

Atente-se na curiosidade de a tela *Vénus e Marte surpreendidos por Vulcano*, de Tintoretto (também Veneziano e da mesma época), representar Vénus a ser destapada por Vulcano, reflectido num espelho ao fundo, enquanto o pequeno Cupido dorme no berço e Marte se esconde debaixo da cama, tentando acalmar o cão que o pode denunciar.



*Vénus ao espelho* (ca.1555), Ticiano (*National Gallery of Art, Washington*)

A técnica veneziana requeria que os artesãos espalhassem uma fina camada de folha de prata ou de estanho sobre uma superfície de mármore (a bancada em que a operação decorria), vertessem sobre ela o mercúrio (formando uma amálgama) e que colocassem de seguida o vidro por cima, certificando-se de que não ficavam bolhas de ar retidas entre este e os metais. Esta preparação era deixada em repouso durante algumas semanas.

Devido à grande toxicidade do mercúrio os artesãos acabavam por morrer bastante cedo. Dizia-se que nas cidades alemãs de Fürth e Nuremberga, que se tornaram dois grandes centros de manufactura de espelhos, os operários desta indústria não tinham um único dente nas gengivas – a queda dos dentes é um dos efeitos mais imediatos da intoxicação com mercúrio. Apesar de tudo, o impiedoso método de Veneza de fabrico de espelhos acabou por prevalecer por três séculos [3-4].

Num aparte refira-se que a primeira campanha contra a exposição ocupacional ao mercúrio surgiu em 1700, com a publicação da obra *De Morbis Artificum Diatriba* (*As doenças dos Trabalhadores*), da autoria do médico italiano Bernardino Ramazzini (1633-1714) que listou as então conhecidas ameaças à saúde encontradas em mais de cinco dezenas de profissões devido a produtos químicos, poeiras e metais (incluindo o mercúrio). Por essa razão, Ramazzini é hoje considerado o fundador da Medicina do Trabalho [4]. Ainda neste contexto valerá a pena mencionar que a deformação física atribuída ao mitológico Vulcano é entendida por muitos como o inevitável resultado da exposição ocupacional ao arsénio – semimetal de elevada toxicidade que aparece frequentemente associado aos minérios de cobre, ferro, chumbo e ouro.

Seria só no século XIX, com o trabalho de Justus von Liebig [5], que o método de fabrico dos espelhos acabaria por mudar. Tudo começou em 1835 quando o químico alemão



*Vénus e Marte surpreendidos por Vulcano* (ca. 1555), Tintoretto (*Alte Pinakothek, Munique*)

verificou que os aldeídos conseguiam reduzir os sais de prata a prata metálica. Esta reacção foi logo adoptada como teste de detecção da presença de aldeídos em materiais orgânicos.

Alguns anos depois, em 1843, o inglês Thomas Drayton patenteou um processo de pratear o vidro em que a película de prata se formava por adição de uma solução alcoólica de óleo de cássia a uma solução amoniacal de nitrato de prata. Embora a patente tenha atraído alguma atenção da indústria, o seu uso (que se restringiu à ornamentação de objectos de vidro de luxo) não prolongou para além da década de 1850, por ser comercialmente pouco viável.



*Justus von Liebig* (1803-1873)

O estímulo que Liebig precisava para propor o fundamento do seu teste de detecção de aldeídos como base de uma nova técnica de manufactura de espelhos acabou por chegar em 1856, vindo de um amigo: o físico, astrónomo e fabricante de instrumentos científicos Carl von Steinheil (1801-1870). Este tentava desde 1847, sem sucesso, aperfeiçoar os espelhos planos dos telescópios; já tinha tentado o método de Drayton e trocado impressões com Rudolph Böttger (1806-1881), químico que desenvolvera métodos químicos e electroquímicos de deposição de películas metálicas sobre vários tipos de materiais, incluindo metais.

Talvez inspirado pelos resultados deBöttger, Liebig verificou que se o vidro fosse previamente coberto com uma superfície de cobre por electrodeposição e só posteriormente mergulhado numa solução amoniacal de nitrato de prata e noutra de glucose (que na forma de cadeia aberta possui uma função aldeídica), a camada de prata obtida era perfeita, sem irregularidades. Liebig patenteou, nacional e internacionalmente, a sua descoberta mas o novo processo de fabrico de espelhos, apesar de alguns sucessos pontuais, não conseguiu competir economicamente com a indústria tradicional. Ironicamente, a invenção só se implantaria depois da morte de Liebig, em 1873, quando foi criada legislação na Alemanha proibindo o uso de mercúrio na manufactura de espelhos, abrindo assim portas à produção em massa dos espelhos modernos, sem recurso ao mercúrio. O espelho em segundo plano na tela de Édouard Manet *Um Bar nas Folies-Bergère*, de 1882, em que toda a cena se reflecte, poderá já ter sido fabricado de acordo com o novo método.

Os descendentes contemporâneos dos espelhos de Liebig já não contêm, porém, prata; este metal passou a ser substituído pelo alumínio, muito mais barato e igualmente com boas propriedades reflectoras. No processo de fabrico actual, o vidro é tapado de um dos lados e suspenso numa câmara de vácuo onde alumínio em pó é aquecido até à vaporização; em contacto com a superfície mais fria do vidro este condensa, formando uma fina folha de elevada reflectância [3,6].

Acresce registar que o método de Liebig não era completamente isento de problemas. Sendo o nitrato de amónio (composto explosivo) um dos produtos secundários da reacção de precipitação da prata, qualquer pequeno vestígio deste sal no espelho bastava para que, sob a acção de um agente de ignição (por exemplo calor), este se estilhaçasse.



*Um Bar nas Folies-Bergère* (1882), Édouard Manet (*The Courtauld Gallery, Londres*)

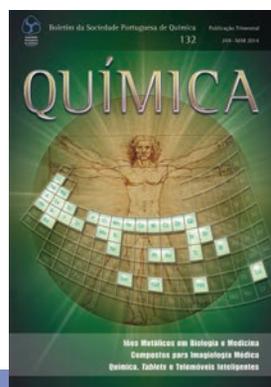
Residirá aí o antigo dito de que “uma cara feia vista ao espelho o faz estilhaçar”?

## REFERÊNCIAS

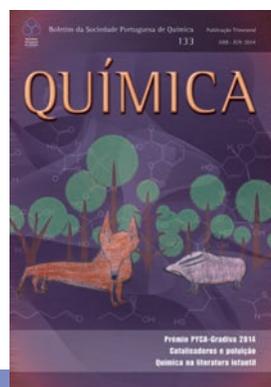
- [1] J.M. Enoch, *Optom. Vis. Sci.* **83** (2006) 775-781
- [2] <http://cabinetmagazine.org/issues/14/mcelheny.php> (acedido a 30/09/2014)
- [3] W.H. Brock, “Justus von Liebig: The Chemical Gatekeeper”, Cambridge University Press, Nova Iorque, 1997
- [4] J. Emsley, “The Elements of Murder – A History of Poison”, Oxford University press, Nova Iorque, 2005
- [5] J.P. André, *Química (Boletim da SPQ)* **131** (2013) 52-53
- [6] J. Schwarcz, “Is That fact? - Frauds, Quacks, and the Real Science of Everyday Life”, ECW Press, Toronto, 2014

João Paulo André  
(jandre@quimica.uminho.pt)

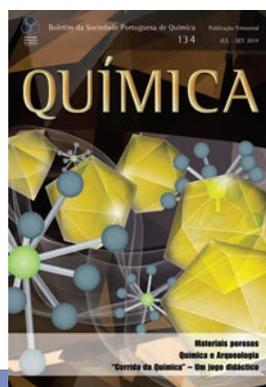
Jan-Mar 2014



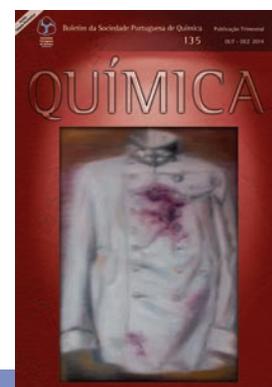
Abr-Jun 2014



Jul-Set 2014



Out-Dez 2014



2014 foi assim ... fique para ver o que temos para si em 2015 ...

**S P Q - SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA**



# ChemistryViews

News & Information Service for Scientists Worldwide



Published by  **ChemPubSoc Europe**

an organization of 16 chemical societies in continental Europe

In close cooperation with society journals like **Chemistry – A European Journal** and **Angewandte Chemie**, the flagship journal of 

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Free to view magazine

 **ChemViews**  
Magazine of ChemPubSoc Europe 



Spot your favorite content at

[www.ChemistryViews.org](http://www.ChemistryViews.org)

 **ChemPubSoc Europe**

**WILEY-VCH**

# PARA UMA CULTURA INTEGRAL: O CONTRIBUTO DA HISTÓRIA DA CIÊNCIA

António Manuel Nunes dos Santos

Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa  
amans@fct.unl.pt

*Na hora da jubilação, ao Rui Namorado Rosa com amizade e a estima de sempre*

**The Contribution of the History of Science toward an Integral Culture** – *We presently inhabit a world where the successes of science and its technological applications inspire admiration amongst our contemporaries. Nonetheless, there remains a sentiment of deep ambivalence before such successes and a gap between science (and its prodigious developments) and society in general which is still not scientifically literate. The transmission of theoretical, fundamental, and applied science is still subject to a centripetal diffusion of knowledge that is peer-driven, self-isolating, and often largely unaware of the intrinsic cultural value of its patrimony.*

*In this paper emphasis will be given to the values of dialogue and conciliation with a view to bridging the gap between the growth of knowledge - veritable mirror of human endeavour and creativity - and the erroneous view that such knowledge must forever remain inaccessible to the uninitiated.*

*The history of science (along with the philosophy of science) are fields of inquiry which help to establish dialogue between knowledge domains, to develop the researcher's critical thinking, to define significant pedagogical concepts, and to surpass the shattered whole still characterising the ensemble of scientific knowledge in favour of an inter- and multidisciplinary approach. The historian and philosopher of science crosses the threshold of the laboratory to study the scientific labour there carried out, follows controversies and subverts all superficial consensus, to give primacy to the arena of scientific memory of which we are all direct and indirect heirs, where intellectual and conceptual perspectives are considered in their economic, social, political, and ethical context as they together foment cultural progress.*

Vivemos num mundo em que o sucesso da ciência e das suas aplicações técnicas provoca admiração nos nossos contemporâneos; contudo, continua a haver um sentimento de ambivalência profunda e um hiato entre a ciência (em vertiginoso desenvolvimento) e uma sociedade que deveria ser cientificamente culta. A transmissão da ciência pura, fundamental e aplicada é ainda sujeita a uma difusão centrípeta do saber, entre pares, isolada e até muitas vezes alheada do valor cultural do seu património intrínseco.

Neste artigo dá-se ênfase ao diálogo e à conciliação entre o desenvolvimento do conhecimento, espelho vivo da aventura e criatividade humanas, e a mistificada inacessibilidade dos saberes pelos profanos.

A História da Ciência (e a Filosofia da Ciência) ajuda(m) a criar pontes nesse diálogo, a desenvolver o espírito crítico do investigador, a clarificar as ideias do pedagogo, a romper a visão fragmentada das áreas científicas em favor de uma abordagem inter e multidisciplinar, a entrar nos Laboratórios e estudar o “trabalho” científico, a seguir controvérsias e a derrubar consensos, dando primazia à arena da memória científica de que todos somos herdeiros, em que as perspectivas intelectuais e cognitivas se encontram inseridas num contexto económico, social, político e ético do progresso das sociedades.

*As ilusões nunca são perdidas. Elas significam o que há de melhor na vida dos homens e dos povos. (Bento de Jesus Caraça)*

*The goal of education is not mastery of subject matter, but of one's person. (David Orr)*

*Estudar é para ele [o estudante] uma necessidade exterior, que lhe é imposta. (Ortega y Gasset)*

Há quarenta anos, no livro *The Devil in Modern Philosophy*, Ernest Gellner afirmava: “Se se reunissem todos os filósofos americanos num único lugar e se se deixasse cair uma bomba atómica sobre eles, a sociedade americana não ficaria minimamente afectada. Ninguém registaria a menor diferença nem haveria qualquer lacuna, nenhum vácuo na economia, a precisar de reparação” [1]. Numa altura dominada pela expansão rápida do conhecimento, numa cultura moderna secular com raízes profundas na ciência,

num mundo dominado por uma sociedade industrial, por uma aplicação e utilização tecnológica feroz e sedutora que caracteriza o desenvolvimento das nações, esta afirmação, esta ideia de aniquilação, de rendição do pensamento, mesmo que atenuada por apenas ser uma afirmação escrita, não concretizada mas não complacente no ver e sentir as “coisas”, além de chocante – os filósofos representam de certo modo o inquiridor perpétuo – evidencia que todos os aspectos desta cultura moderna incluindo as formas do criticismo activo, dos profundos comprometimentos intelectuais e convicções são hoje em dia subordinados ao universo económico impetuoso e dominante que subjuga o homem-comum, e, tudo o resto, é de certo modo invisível. Este universo, além de subjugar o homem, amarra-o, controla-o, aprisiona-o e até mesmo “aniquila-o” já que ele não tem qualquer controle ou poder para agir nesse domínio. Aparentemente, o que conta são os “negócios” e a “utilidade” da vida e assiste-se à indiferença generalizada e ao silêncio

cúmplice face à injustiça e cega preservação da miséria, à exclusão social e ao aumento contínuo da riqueza inaudita e desmesurável. É precisamente isto que constitui, no dizer de Marcuse [2], “the most impartial indictment even if they are not the *raison d’être* of this society but only its by-product: its sweeping rationality, which propels efficiency and growth, is itself irrational”.

E nesta jornada, nesta errância que é a nossa, que já não alimenta o que de mais nobre tem o valor humano, o *savoir-vivre ensemble*, a prática do bem-estar comum, da responsabilidade por si e pelo Outro, do auxílio mútuo, da inter-ajuda, de exigir o cumprimento da responsabilidade do Estado pelas funções sociais que lhe são imputáveis, como explicar que o cidadão tenha consciência que vive numa sociedade racional (científica) e avançada? Perante a apatia do cidadão, face à manipulação que subverte a função cognitiva, a sua renúncia à militância pelos seus ideais e até mesmo à revolta perante o despudor e o desnorte daqueles que efectivamente detêm o poder político e económico, como explicar o fascínio que sente pelas aplicações tecnológicas que muitas vezes não consegue compreender mas que satisfaz os seus prazeres primários e utilitários e suposta livre escolha?

Como se passa de um mundo de objectivação científica e tecnológica tão activa e consciente e adormecer, senão esquecer, o mundo dos valores? Na verdade, os valores e os ideais constituintes da nossa humanidade, altamente dignificantes – moral e espiritualmente – contam menos neste mundo das vivências – assuntos “reais” da vida – talvez por serem não-objectivos e consequentemente não contabilizáveis. Hoje, para os Estados, o ser humano é um custo (e até um ser descartável!) – facto que propagandeia e dissemina – e que fatalmente o homem “médio” assimila facilmente. Como contrariar isto e, simultaneamente, dar consciência ao ser humano da possibilidade de se construir ele-mesmo? Qual é o papel da educação e da universidade – como missão – no contributo desse direito inato de cada um se realizar plenamente e participar activamente na formação do seu próprio *avenir*, ou melhor, no seu *devenir*? Ortega y Gasset – um dos meus referenciais intelectuais desde a juventude (há os que ficam como âncoras) – num magnífico texto da sua obra *Misión de la Universidad*, intitulado “Lo que la Universidad tiene que ser «primero», la universidad, la profesión y la ciencia”, indica-nos: “hay que hacer del hombre medio, *ante todo*, un hombre culto – situarlo a la altura de los tiempos” [3]. O autor vai até mais longe do que apenas situá-lo à altura do tempo, mencionando no parágrafo seguinte, “y muy especialmente a la altura de las ideas del tiempo”.

Como formar este homem consciente das ideias do seu tempo? Como despertar a “alma colectiva das massas”, para parafrasear um outro dos meus referenciais intelectuais – Bento de Jesus Caraça – para essa tarefa? O homem culto é, para o referido autor, aquele que 1) tem consciência da sua posição no Cosmo e, em particular, na sociedade a que pertence; 2) tem consciência da sua personalidade e da dignidade que é inerente à existência como ser humano; e 3)

faz do aperfeiçoamento do seu ser interior a preocupação máxima e fim último da vida [4]. Como preservar este grau de saber, mas mais do que preservá-lo, como praticá-lo?

Durante as últimas décadas, e hoje ainda, era e é suposto a escola fornecer conhecimento específico de modo a que o diplomado possa ser inserido no mercado de trabalho com direito a um emprego de qualificação correspondente à sua “formação”. Fez-se disso a prioridade primeira e última da Escola: a aquisição de competências, afirmam responsáveis políticos, docentes e discentes, todo o sistema, é dever a ser cumprido. Se a educação, porém, – e este é um olhar íntimo e pessoal – tiver por objectivo a realização completa do homem, o desabrochamento completo do homem em toda a sua riqueza e complexidade das suas expressões e compromettimentos, das suas aspirações e concretização de ideias, dos laços que tece como indivíduo e na multiplicidade das suas partilhas, se tiver em consideração que o homem é essencialmente um ser criativo, inatamente solidário, um ser livre, consciente das suas escolhas e um ser em metamorfose contínua, perpetuamente contínua, então para formar este homem completo – um ser que sabe e deseja aprender a ser – a educação não pode ser temporal (o período escolar) e com o intuito apenas em transmitir conhecimento fragmentado e especializado.

A minha utopia é que a Escola seja impulso para o indivíduo se tornar criador de sonhos (“o sonho comanda a vida”, como diria António Gedeão) e demolidor de dogmas, que lhe permita expandir os seus conhecimentos e fazer deles parte integrante da sua cultura e simultaneamente estender as suas fronteiras – a do sentir e a do pensar, em suma, a do viver em plenitude – até ao infinito, comandado sempre pela sua humanidade assente em valores éticos, de integridade e de justiça social.

Como pode então a História de Ciência – mormente a história das ideias científicas – contribuir para uma cultura integral? Escrever História tem em geral facetas duplas: escrever *sobre* e escrever *por quem*; narrar *sobre* e reconstruir *o quê*; descrever *sobre* e interpretar *algo*. Esta relação dupla envolve uma interacção entre a interpretação dos factos e o intérprete, reversibilidade que, embora não necessariamente viciada, acontece subtilmente na nossa compreensão: “Into every act of knowing there enters a passionate contribution of the person knowing what is being known and that this coefficient is no mere imperfection but a vital component of his knowledge” [5].

Por outro lado, se se considerar a racionalidade como critério do pensamento humano e o principal propósito da ciência descobrir coisas *novas*, centrada essencialmente no presente e com previsibilidade no futuro, que interesse tem a história e a reconstrução lógica dos acontecimentos e das ideias e explicações (teorias) do passado? Os livros de textos científicos, fonte de formação dos cientistas, mutilam a história da ciência e até a imagem de uma determinada área da ciência; apresentam o registo do conhecimento de modo objectivo e acumulativo, raramente evidenciam as controvérsias, confinam-se ao contexto de explicação e de

aplicação e legitimam a crença que o cientista é um *master builder*, sempre com sucesso, seguindo um processo linear de assentar as suas ideias sobre a dos gigantes do passado, permitindo-lhe ver mais além do que os seus predecessores. Esses mesmos livros de texto têm por objectivo explicar factos, proclamando sempre as “verdades científicas” de modo a impedir que se gerem dúvidas e inquietações, que são precisamente os entrelaços fecundos e necessários ao progresso científico, e que asseguram a verdadeira paixão pelo conhecimento. Associado a isto temos ainda a visão do *knowing teacher* que, segundo Mortimer Adler no seu artigo “The Professor or the Dialogue”, ajusta o aluno a uma assimilação e a uma proficiência em memória verbal, ao que designa *learning by instruction* [6].

Nesta perspectiva, a educação científica é estreita e rigorosa, exclui alternativas e sobretudo dá ênfase, senão a uma única visão, à corrente de compreensão vigente da comunidade científica – as ideias científicas, as teorias, exigem consenso da comunidade científica e a ciência, actualmente, embora praticada por indivíduos, é um empreendimento em grupo –, uma compreensão que é facilmente aceite de modo acrítico, muitas vezes sem necessidade de reflexão sobre os conceitos, dado o sucesso que a teoria apresenta na resolução de muitos problemas.

Ora, a história da ciência, na sua vertente de evolução das ideias científicas, mostra que a ciência é um processo por demais complexo para ser constituído apenas por regras lógicas, que possui períodos de crise que conduzem a novas regras – novos paradigmas, em termos kuhnianos – que permitem o desenvolvimento de novos modelos explicativos não só dos fenómenos que violam as regras anteriores bem como dos fenómenos que eram logicamente explicadas por essas mesmas regras. Em suma, temos uma nova visão explicativa de todos os fenómenos.

Esta abordagem de reconstrução do passado ajusta-se fortemente a uma outra visão do professor, a do *inquiring teacher*, bem como de um novo modelo de aprendizagem – *learning by discovery*. Neste processo de (re)descoberta, de (re)criação toma-se consciência que o modelo de conhecimento é transformador e controverso em vez de narrativo e sempre consensual e que o facto experimental, tantas vezes considerado objectivo, e a sua descrição e explicação dependem já de uma articulação, de um vínculo à teoria assimilada pelo cientista. Einstein estava muito consciente disso. Heisenberg, numa conferência realizada em 24 de Abril de 1973, em Washington D. C., num simpósio patrocinado pela *Smithsonian Institution* e pela *National Academy of Sciences*, em que comenta as três influências mais importantes da tradição na ciência – na selecção dos problemas, no método e nos conceitos – ao abordar o enfoque empírico da ciência, ou seja, à abordagem em que se deduzem os modelos e as relações matemáticas a partir de resultados empíricos, relata-nos:

*If this were the whole truth, we should, when entering into a new field, introduce only such quantities as can directly be observed, and formulate natural*

*laws only by means of these quantities. When I was a young man, I believed that this was just the philosophy which Einstein had followed in his theory of relativity. Therefore I tried to take a corresponding step in quantum theory by introducing the matrices. But when I later asked Einstein about it, he answered, ‘This may have been my philosophy, but it is nonsense all the same. It is never possible to introduce only observable quantities in a theory. It is the theory which decides what can be observed’ [7].*

O que Einstein pretendia dizer é que não se pode separar a observação das relações matemáticas e dos conceitos teóricos já adquiridos e que fazem parte da estrutura mental do observador.

Esta interligação não é evidenciada na educação científica. Antes, pelo contrário, como doutrinação ideológica, o que é realmente transmitido ao jovem praticante de ciência são teorias científicas sedimentadas através das aplicações práticas e não pela interligação “exemplo-regras abstractas”. Muitas vezes tal doutrinação induz à memorização dos conceitos, a uma domesticação do pensamento, que cria grilhões difíceis de ultrapassar no trajecto criativo dos praticantes da ciência. Além disso, tal prédica pode até ter consequências mais graves. A proficiência em memória verbalizada instiga não só uma indisponibilidade para *saborear* o conhecimento mas sobretudo propicia o esquecimento, ou pior ainda, incita a uma *disponibilidade para facilmente se libertar dele*. O deitar fora, com muito à-vontade, o conhecimento adquirido durante o período de aprendizagem e mormente após a avaliação – os exames – é sem dúvida perturbador. Muito provavelmente, os iniciados fazem-no porque no processo de transmissão – no aprender e no ensinar – não se foca o modo como o conhecimento é produzido, donde provém, dando-se ênfase à utilidade, à prática desse conhecimento, subalternizando-se assim a compreensão. Há pouco uso de fontes primárias que auxiliariam a “apreender” como uma determinada área científica evoluiu, um trajecto que é um processo inacabado; muito do saber, ainda hoje, é dado em pacotes de “conhecimento acabado”, dogmaticamente afirmado, pacotes de conhecimento que devem ser aplicados em alguns exemplos práticos.

Se há mudança na estrutura da universidade, hoje mais consciente da dicotomia ensino-investigação, essa mudança é só parcial dado que se encontra muito direccionada apenas ao docente. Mas para o aluno, qual é o valor do conhecimento? Se ele não souber integrar o conhecimento – obstinação da sua paixão – na sua própria cultura e não fazer dele o motor da sua transformação como ser humano, pode sem dúvida ter algum prazer intelectual, mas seguramente não engrandece a sua sensibilidade espiritual nem o alerta para a responsabilidade social como cientista e como cidadão para as consequências da utilização do seu conhecimento. Esse conhecimento *de per si*, isolado, não reflectido, pode até, em certa medida, outorgar-lhe uma falsa convicção de superioridade e alguma arrogância face aos profanos – desconhecedores das teorias científicas e

técnicas – mas não o integra na plena cultura do seu tempo, que lhe permite descobrir as diferenças e as injustiças do mundo em que vive e no qual se tem de inserir. É também aqui que a História da Ciência, numa dimensão mais abrangente de narrativa, de *story-telling*, pode transmitir, de modo mais aliciante e simplificado, mas não menos correcto, não só a praxis dessa actividade humana que é a ciência, mas sobretudo alargar as fronteiras dos cidadãos para uma melhor compreensão do que se passa na arena fechada dos laboratórios e das instituições onde se *constrói* o conhecimento e alertar o cidadão-comum para as implicações e consequências da (má) utilização da ciência.

O conhecimento científico é hoje, como nunca, parte integrante e indispensável da cultura. Vivemos numa sociedade de cada vez mais rapidamente tocada pelo progresso científico e evolução tecnológica, contudo, o homem alheado ou que presume não ser capaz de compreender o que se passa nas áreas científicas, mesmo que superficialmente, é, de certo modo, cúmplice das barbáries que se cometem nesta Idade científico-tecnológica. A ciência, isolada do meio social, pode tornar-se não só demasiado poderosa, ambiciosa e dinâmica mas também demasiado perigosa para ser deixada a si própria.

Ao cidadão, e ao cientista em particular, cabe-lhe uma grande responsabilidade quanto à edificação do futuro. No que respeita à inter-relação responsabilidade-ética de um cientista, Primo Levi, o químico, escritor e sobrevivente de Auschwitz, num magnífico texto intitulado em inglês “Hatching the Cobra”, coligido na sua obra *Racconti e Saggi*, conta a história de Fálaris, o tirano de Agrigento (Séc. VI, A.C.) e do seu cruel artífice, Perilo. Este, fascinado para mostrar a sua perícia, constrói um touro, a pedido do tirano, em que um homem, colocado no seu interior, “mugiria” quando se acendesse lume debaixo dele, não se dando conta que ele próprio seria a primeira vítima. Primo Levi alerta assim o cientista para não se deixar cair na tentação da resolução de problemas sem saber a finalidade “to which your work is directed”. E, consciente da enorme sedução do cientista em abraçar instintiva e inegavelmente uma questão ou problema do qual não sabe a resposta, conclui:

*Whether you are a believer or not, whether a ‘patriot’ or not, if you are given a choice do not let yourself be seduced by material or intellectual interests, but choose from the field that which may render less painful and less dangerous the journey of your contemporaries, and of those who come after you. Don’t hide behind the hypocrisy of neu-*

*tral science; you are educated enough to be able to evaluate whether from the egg you are hatching will issue a dove or a cobra or a chimera or perhaps nothing at all. As for basic research, it can and must continue: if we were to abandon it, we would betray our nature and our nobility as ‘thinking reeds,’ and the human species would no longer have any reason to exist [8].*

Saibamos nós termos uma verdadeira percepção da aplicação do trabalho científico em que estejamos envolvidos, um sentido de responsabilidade ímpar de modo a sermos dignos de respeito pelas gerações futuras.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] E. Gellner, *The Devil in Modern Philosophy*, Routledge & Kegan Paul, 1974
- [2] H. Marcuse, *One Dimensional Man, Studies in the Ideology of Advanced Industrial Society*, Boston: Beacon Press, 1964, p. xiii
- [3] J. Ortega y Gasset, *Misión de la Universidad y otros ensayos sobre educación y pedagogia*, Alianza Editorial/Revista de Occidente, 1930, p.53
- [4] B. de J. Caraça, “A cultura integral do indivíduo, Problema central do nosso tempo”, Conferência proferida na Universidade Popular Portuguesa, 25 de Maio de 1933, in *Cultura e Emancipação (1929-1933), Obra integral de Bento de Jesus Caraça*, Edição Crítica, Campo das Letras, 2002, pp.97-128
- [5] M. Polanyi, *Personal Knowledge, Towards a Post-Critical Philosophy*, The University of Chicago Press, 1958, p. xiv
- [6] M.J. Adler, “The Professor or the Dialogue,” The Mortimer J. Adler Archive, Cross Current Lecture of the Year (1958-59), [http://radicalacademy.com/adler\\_the\\_%20professor.htm](http://radicalacademy.com/adler_the_%20professor.htm) (acedido a 28/05/2014)
- [7] W. Heisenberg, “Tradition in Science, Science and Public Affairs”, *Bulletin of the Atomic Scientists* vol. 29 (1973), pp.4-10
- [8] P. Levi, “Hatching the Cobra”, in *The Mirror Maker*, trad. Raymond Rosenthal, London: Abacus, 2002, p. 214.

## BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

- J. Ortega y Gasset, “Sobre o estudar e o estudante”, in H. Arendt, E. Weil, B. Russell, J. Ortega y Gasset, *Quatro textos excêntricos*, Olga Pombo (pref. e trad.), Relógio d’Água, 2000, pp.87-103
- D. Orr, What is Education for?, in *The Learning Revolution, In Context* (IC # 27), Winter, Boston: Beacon Press, 1991, p.52

**EuCheMS**  
European Chemical Sciences



# A QUÍMICA EM CÓDIGO(S)

Vasco D.B. Bonifácio

Instituto de Telecomunicações, Instituto Superior Técnico, Lisboa  
vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

**Teaching Chemistry With Chess Codes** – *Smart phones and tablets are becoming increasingly popular in the classroom. Science teachers in particular can strongly benefit and take advantage of these novel technologies to draw the student's attention. Chess codes, QR and molecular glyph 2D codes, can be a powerful tool to engage a new savvy kid's generation into simple and fun hands-on activities.*

O uso de telefones inteligentes e *tablets* na sala de aula como ferramentas de trabalho é já uma realidade em alguns países. Os professores podem beneficiar enormemente destas novas tecnologias e usá-las para captar a atenção dos alunos para os conteúdos leccionados, em particular na área das Ciências. Os códigos Xadrez em 2D, códigos QR e glifos moleculares, são exemplos de novas ferramentas para motivar os jovens na aprendizagem da Química através de actividades simples e divertidas.

O ensino da Química tem evoluído de forma notável na última década. É facto admirável a quantidade de novas ferramentas que temos hoje ao nosso dispor. Neste sentido os professores, em todos os níveis de ensino, precisam de estar atentos e tirar o máximo partido das vantagens (e são muitas) que elas nos trazem. A sala de aula, na maioria das escolas, tem vindo a tornar-se num autêntico laboratório digital. Quadros interactivos, computadores, telefones inteligentes e *tablets* passaram a ser ferramentas do dia-dia; e o velho quadro de ardósia, o pau de giz e o apagador parecem estar destinados a objectos de museu.

O uso de telemóveis inteligentes e *tablets* como ferramentas de ensino, embora à primeira vista possam fazer recear alguns pais e professores pelo seu potencial de distração, trazem enormíssimas vantagens ao processo de aprendizagem. À parte do conteúdo pedagógico que oferecem, através do uso de aplicações de conteúdo didáctico, são igualmente muito atractivos para os jovens, aumentando não só os níveis de atenção mas também o interesse pelas matérias leccionadas. Alunos motivados conduzem sempre a melhores desempenhos na sala de aula, quer ao nível intelectual, quer ao nível comportamental. A estratégia de *m-learning* tem vindo a ser adoptada na sala de aula de Química [1] e prevê-se que se generalize nos próximos anos. Neste sentido têm vindo a ser desenvolvidas ferramentas que tornam este processo fácil e muito atractivo. São exemplo disso os códigos *Quick-Response* (QR), códigos de barras 2D (Figura 1). Na área da Química encontramos já alguns exemplos de como podem ser usados numa sala de aula, tais como a Tabela Periódica áudio [2,3] e a Tabela dos Prémios Nobel da Química 1901-2011 [4,5]. Contudo o potencial dos códigos QR pode ser explorado em todas as áreas do conhecimento, e são exemplos recentes desta versatilidade o jardim botânico interactivo na Universidade de Cambridge [6] e o uso de códigos QR no ensino de Anatomia num curso de Medicina [7].

Muito recentemente foram desenvolvidos os códigos QR químicos, os chamados *molecular glyphs* (MG) [8]. Os có-

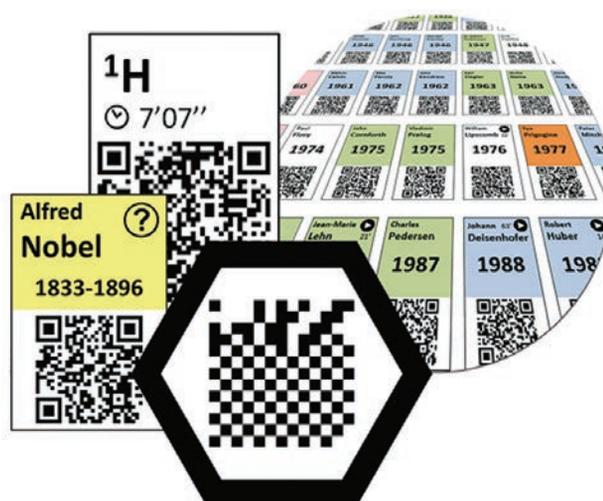


Figura 1 – Exemplos de códigos QR usados em Educação em Química

digos MG distinguem-se dos códigos QR pelo seu formato em hexágono, contendo no interior um padrão em xadrez. Esta nova geração de códigos QR pode ser gerada de forma livre usando o software *SketchEI* [9], permitindo ao utilizador gerar estruturas de compostos químicos ou de reacções químicas após a sua leitura com um telemóvel inteligente ou *tablet*. Para isso basta ter instalada a aplicação *Living Molecules*, disponibilizada gratuitamente na loja da *Apple*. Aguardamos a versão para o sistema *Android*, que se espera estar acessível em breve.

O uso dos códigos MG, bem como a sua construção, é muito simples. Depois de fazer o *download* do software *SketchEI*, o utilizador apenas necessita de desenhar a molécula ou a reacção química (ou abrir um ficheiro \*.mol de estruturas previamente desenhadas), e partilhá-las através do site da *MolSync* [10]. Após o *upload* do ficheiro criado o utilizador pode abrir o *link* (URL) que é gerado automaticamente, sendo direccionado para o *website* onde se encontra o código MG.

A título de exemplo, a Tabela 1 mostra informação sobre corantes alimentares de cor verde, legalmente aprovados, e os respectivos códigos MG.

Os códigos poderão ser usados no contexto de uma aula de Química ou de gastronomia molecular. Os alunos, após fazerem o *scan* do código com um telemóvel inteligente ou um *tablet*, ficarão a conhecer a estrutura química do corante, a qual irá aparecer automaticamente no *écran* após a leitura. Esta é uma forma diferente de transmitir a informação, e que tem por objectivo não só dotar os professores com novas ferramentas de ensino, mas também despertar nos alunos curiosidade e um interesse acrescido pela Química.

## REFERÊNCIAS

- [1] A.J. Williams, H.E. Pence, *J. Chem. Educ.* **88** (2011) 683- 686
- [2] V.D.B. Bonifácio, *J. Chem. Educ.* **89** (2012) 552-554
- [3] V.D.B. Bonifácio, *Química (Boletim da SPQ)* **127** (2012) 71-72
- [4] V.D.B. Bonifácio, *J. Chem. Educ.* **90** (2013) 1401-1402
- [5] V.D.B. Bonifácio, *Química (Boletim da SPQ)* **132** (2014) 59-60
- [6] G.M. Battle, G.O. Kyd, C.R. Groom, F.H. Allen, J. Day, T. Upton, *J. Chem. Educ.* **89** (2012) 1390-1394
- [7] C.J. Traser, L.A. Hoffman, M.F. Seifert, A.B. Wilson, *Anat. Sci. Educ.* (2014) DOI: 10.1002/ase.1499
- [8] *Molecular Materials Informatics* website (<http://molmat-inf.com>, acedido a 15/10/2014)
- [9] *SketchE1* website (<http://sketchel.sourceforge.net>, acedido a 15/10/2014)
- [10] *MolSync* website (<http://molsync.com>, acedido a 15/10/2014)

**Tabela 1** – Códigos MG (*molecular glyphs*) de corantes alimentares de cor verde

Nome	No. E	No. CI	Código MG	Aprovação legal*
Clorofila	E140	75810		A, CA, CN, EU, IN
Complexos de cobre de clorofilas	E141 (i) E141 (ii)	75810 75815		A, CA, CN, EU, US
Green S	E142	44090		AU/NZ, EU
Fast Green FCF/ Green No. 3	E143	42053		A, CA, IN, JP, M, US

\* O uso de corantes alimentares está devidamente regulamentado. Cada País ou Estado possui legislação própria ou segue regulamentação internacional. A= Austrália, CA= Canadá, CN= China, EU= Europa, IN= Índia, JP= Japão, M= Países do Mercosul (Argentina, Brasil, Paraguai, Uruguai, Venezuela e Bolívia), NZ= Nova Zelândia, US= Estados Unidos da América.

## Sociedade Portuguesa de Química

[SOCIEDADE](#)
[PRÉMIOS](#)
[BOLETIM](#)
[OLIMPIADAS](#)
[CONGRESSOS](#)
[NOTÍCIAS](#)
[REVISTAS EUROPEIAS](#)
[CONTATOS](#)

visite-nos  
[www.spq.pt](http://www.spq.pt)



SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE QUÍMICA



## 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

O ferro desempenha um papel muito importante na nossa saúde sendo mesmo indispensável a um grande número de funções vitais. É essencial consumir diariamente alimentos ricos em ferro. Podemos encontrar alguns dos alimentos que se dizem enriquecidos com ferro, mas o que significa? Na presente actividade iremos observar a presença de ferro nos flocos de cereais do pequeno almoço, utilizando uma propriedade dos materiais - o magnetismo.

### O que há para o pequeno-almoço?

#### Material:

- Um copo de plástico
- Uma colher de plástico
- Uma taça com cerca de 50 g de cereais enriquecidos com ferro
- Taça vazia
- Água
- Íman
- Saco de plástico com fecho
- Rolo de cozinha



**Procedimento:**

1. Encher uma taça com água e colocar lá dentro 3 flocos de cereais. Os cereais ficam a flutuar.



2. Aproximar o íman dos flocos sem lhes tocar. Afastar ligeiramente o íman deslocando-o por cima da água. O que acontece?
3. Colocar cerca de 50 g de flocos de cereais dentro de um saco de plástico com fecho e selar o saco. Com o rolo de cozinha esmagar os flocos reduzindo-os a pó.



- Transferir o pó dos flocos para dentro de um copo de plástico e adicionar água. Forma-se uma suspensão.



- Com uma mão fixar o íman junto da parede do copo, com a outra mão mexer a suspensão com a colher de plástico para que o conteúdo seja agitado. Continuar a mexer durante pelo menos dois minutos.



- Parar de mexer e cuidadosamente desviar o íman da parede do copo. Observar a zona do copo onde se encontrava encostado o íman. Deslizar o íman, afastando ligeiramente da zona inicial mantendo o contacto com o copo. Observar.



**Explicação:**

Existem variedades de flocos de cereais que se dizem ricas em ferro. De facto este elemento é essencial à nossa saúde e apesar de poder ser introduzido de diversas formas na composição dos cereais por vezes a maneira mais simples consiste em adicionar partículas de ferro metálico (ferro elementar). A razão desta escolha prende-se com a estabilidade no armazenamento do produto e também pelo facto desta opção não alterar o sabor dos cereais. A ingestão diária de ferro é importante porque este mineral é essencial a muitas funções, uma das quais é o transporte de oxigénio e dióxido de carbono no nosso organismo. O íman que utilizámos nesta actividade, tal como os que costumamos colocar nos frigoríficos, é magnético, o que quer dizer que à sua volta é criada uma zona onde se sente uma força magnética que não conseguimos ver – chama-se o campo magnético. O íman tem duas extremidades, o polo norte e o polo sul. Os polos iguais repelem-se, ou seja afastam-se, mas os polos diferentes atraem-se, aproximam-se. O ferro é um material magnético, o que quer dizer que consegue sentir o campo magnético do íman. Outros metais também magnéticos são o níquel e o cobalto. Quando aproximámos o íman dos flocos de cereais que se encontravam na taça com água, provocámos um movimento, que pode ter sido de aproximação ou afastamento, assim que se encontraram suficientemente próximos para sentir o campo magnético. Em consequência, os flocos deslizaram pela superfície da água. Quando triturámos os flocos de cereais e os colocámos numa suspensão em água, libertámos as partículas de ferro que estavam na constituição dos flocos. Ao agitar a suspensão estas foram atraídas, concentrando-se junto do íman, seguindo-o quando o deslocámos.

Quando ingerimos estas partículas de ferro na nossa alimentação, o estômago consegue transformá-las noutras formas de ferro para que as possamos absorver, no entanto só uma parte é efectivamente transformada e por isso é muito importante a sua ingestão diária nas doses recomendadas.

**Bibliografia**

[1] Adaptado de *JCE Classroom Activity #66*, E.K. Jacobsen, J. Maynard; *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 1584A-B



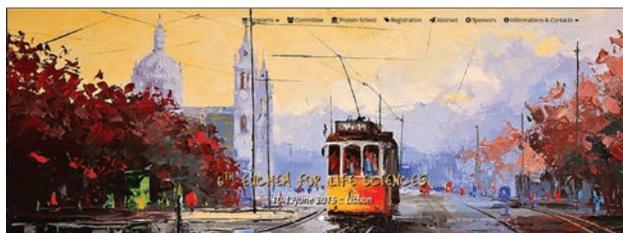
## 2<sup>nd</sup> Symposium on Medicinal Chemistry of University of Minho

O 2<sup>nd</sup> *Symposium on Medicinal Chemistry of University of Minho*, organizado pelo Departamento de Química da Universidade do Minho, terá lugar a 8 de Maio de 2015 na Universidade do Minho, *Campus* de Gualtar.

O Simpósio reunirá investigadores de reconhecido mérito, provenientes da indústria farmacêutica e da academia, para apresentação e discussão de temas actuais de grande relevo e interesse no âmbito da Química Medicinal. Do programa fazem parte duas lições plenárias, três comunicações orais convidadas e quatro comunicações orais seleccionadas de entre os trabalhos submetidos. Durante o dia estarão expostos os trabalhos submetidos para apresentação em *poster*, que poderão ser discutidos em duas sessões, uma durante a manhã e outra durante a tarde.

O Simpósio é dirigido a todos os investigadores, estudantes e outros profissionais com interesse na área da Química Medicinal.

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



## 6<sup>th</sup> European Conference on Chemistry for Life Sciences (6<sup>th</sup> ECCLS)

A 6<sup>th</sup> *European Conference on Chemistry for Life Sciences* (6<sup>th</sup> ECCLS) terá lugar em Lisboa, de 10 a 12 de Junho de 2015, sendo realizada sob os auspícios da Sociedade Portuguesa de Química e da Divisão de Química das Ciências da Vida da EuCheMS. Esta conferência contará com a participação de cientistas com experiência em diferentes áreas científicas com vista à integração de conhecimentos nos domínios da química e da biologia.

Os tópicos da conferência são: Proteómica baseada em actividades e proteómica analítica; Quimiogenómica; Bioconjugados: novos desenvolvimentos metodológicos e aplicações em biomedicina; Bionanomateriais: nanopartículas em terapia e diagnóstico; Planeamento e síntese de derivados de ácidos nucleicos terapêuticos; Glicoquímica e glicoproteínas; Análise conformacional de biomacromoléculas; Reacções enzimáticas (novos mecanismos enzimáticos; o papel da dinâmica na função enzimática); Controlo pela luz dos processos biomoleculares; A modulação de interacções proteína-proteína; Reconhecimento molecular e biocatálise; Neuroquímica: mecanismos moleculares da neurodegeneração; Novas tendências na química bioinor-

gânica; Novos alvos em química medicinal; Química de péptidos e proteínas; Síntese de compostos biologicamente activos; Metais em Biologia.

A anteceder a conferência, durante os dias 8 e 9 de Junho, realizar-se-á a *Protein School* com participação limitada a 50 pessoas, na qual serão abordados tópicos relacionados com a “Identificação de novos alvos em Medicina e Biologia - Técnicas aplicadas”.

[6eccls@chemistry.pt](mailto:6eccls@chemistry.pt)

<http://6eccls.eventos.chemistry.pt/>



## European Polymer Federation Congress 2015 (EPF 2015)

O *European Polymer Federation Congress 2015* decorrerá em Dresden, na Alemanha, de 21 a 26 de Junho de 2015, e é promovido pela Federação Europeia de Polímeros (EPF), a Sociedade Química Alemã (GDCh) e o *Leibniz Institut für Polymerforschung Dresden eV* (IPF), sob os auspícios da IUPAC.

Os materiais poliméricos são essenciais para um desenvolvimento sustentável da sociedade e a base para inovações em tecnologias modernas, contribuem de forma significativa para o avanço nas ciências da vida, mobilidade e tecnologias de comunicação e para enfrentar desafios essenciais em energia e meio ambiente.

O congresso constituirá uma plataforma importante para promover o intercâmbio internacional e interdisciplinar, na vanguarda da ciência dos polímeros abordando as seguintes temáticas: Avanços na síntese macromolecular: desde estruturas poliméricas de precisão até materiais poliméricos interactivos; Nanomateriais e compósitos: preparação, caracterização, processamento, modelação, aplicação; Polímeros e biologia: polímeros bio-inspirados e bioactivos, bio-híbridos e polímeros na bio-interface; Da ciência de polímeros à ciência da matéria mole; Mais com menos: os polímeros enfrentam os desafios dos recursos, sustentabilidade e eficiência energética; A era pós-silício: polímeros e electrónica orgânica.

[s.kirrwald@gdch.de](mailto:s.kirrwald@gdch.de)

[www.epf2015.org](http://www.epf2015.org)



## 7<sup>th</sup> Spanish-Portuguese-Japanese Organic Chemistry Symposium

O 7<sup>th</sup> *Spanish-Portuguese-Japanese Organic Chemistry Symposium* (7 SPJ-OCS) é organizado pelas comunidades Portuguesa, Japonesa e Espanhola de química orgânica, mas está aberto a toda a comunidade científica mundial.

O 7<sup>o</sup> Simpósio SPJ-OCS sucede aos de Lisboa (2012), Osaka (2009), Santiago de Compostela (2006), Santa Cruz de Tenerife (2003), Kyoto (2000) e Alicante (1997). O

evento será realizado na Faculdade de Química da Universidade de Sevilha entre 23 e 26 de Junho de 2015.

Este simpósio vai reunir cientistas com experiência em química orgânica e áreas afins, nomeadamente: Catálise homogénea e heterogénea; Síntese; *Design* molecular; Química de materiais e Química medicinal. Esta conferência tem como objectivos a partilha de descobertas mais recentes e estimular discussões sobre as tendências actuais neste domínio científico e ainda promover novas colaborações. O programa científico deste simpósio incluirá lições plenárias, comunicações orais e sessões de painéis.

[abel.ros@iiq.csic.es](mailto:abel.ros@iiq.csic.es)  
<http://www.7spjocs.com/>



#### XXIV Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química

O XXIV Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química terá como tema “Química para o Desenvolvimento Sustentável”, e será realizado em Coimbra entre 1 e 3 Julho de 2015. A abrangência do encontro é uma oportunidade para a reunião de pessoas de diversas áreas da academia e da indústria com o objectivo de discutir o futuro da Química e sua relevância na solução de problemas globais para o desenvolvimento de um mundo sustentável. Assim, serão apresentados trabalhos nas diferentes áreas da química focados em temas como: Processos catalíticos sustentáveis; Aplicação de recursos biológicos renováveis; Energia alternativa; Novos Materiais; Fotoquímica; Química Analítica e Ambiente; Química para a remediação de água; Química para o desenvolvimento sustentável de alimentos; Química para o desenvolvimento sustentável da saúde.

No programa estão previstas conferências plenárias apresentadas por cientistas nacionais e internacionais, palestras convidadas, comunicações orais seleccionadas de entre os resumos submetidos e comunicações em painel. Além disso, destaca-se um painel de discussão, em que estarão juntos professores, industriais, directores de Departamentos de Química e líderes nacionais do sistema educacional para discutir a sustentabilidade da Química nas escolas secundárias portuguesas e universidades.

[eventos@spq.pt](mailto:eventos@spq.pt)  
<http://xxivenspq.eventos.chemistry.pt>



#### 11<sup>th</sup> International Symposium on Ionic Polymerization (IP'15)

O 11<sup>th</sup> International Symposium on Ionic Polymerization (IP'15) terá lugar na Universidade de Bordéus, entre 5 e

10 de Julho de 2015, organizado pelo Laboratório de Química dos Polímeros Orgânicos do Instituto Politécnico de Bordéus e patrocinado pela IUPAC. O IP'15 será o último de uma série de reuniões bem-sucedidas, as mais recentes das quais foram realizadas em Awaji (Japão, 2013), Akron (EUA, 2011) e Cracóvia (Polónia, 2009).

O Simpósio IP'15 tem origem na série de simpósios internacionais sobre polimerização catiónica, aniónica e de abertura de anel, que foram fundidos originando o Simpósio Internacional sobre polimerização iónica em 1995, realizado em Istambul (Turquia).

Os tópicos do Simpósio abrangem a investigação académica e aplicada nas áreas de mecanismos de polimerização aniónica, catiónica e afins. Contribuições relacionadas com outros métodos de polimerização (catalítica, por radicais livres e polimerizações passo-a-passo) serão também consideradas, bem como aplicações industriais.

[ip15bordeaux@enscbp.fr](mailto:ip15bordeaux@enscbp.fr)  
<http://ip15.sciencesconf.org/>



#### 6<sup>th</sup> Workshop on Green Chemistry and Nanotechnologies in Polymer Chemistry

Na sequência dos encontros anteriores realizados em Pardubice (República Checa, 2010), Riga (Letónia, 2011), Cracóvia (Polónia, 2012), Pisa (Itália, 2013) e San Sebastian (Espanha, 2014), o Instituto Politécnico de Bragança recebe o 6<sup>th</sup> Workshop on Green Chemistry and Nanotechnologies in Polymer Chemistry, que irá decorrer entre os dias 15 e 17 de Julho de 2015. A realização da conferência contará com o apoio do Brigantia-EcoPark, Parque de Ciência e Tecnologia de Bragança. O programa integrará conferências plenárias proferidas por investigadores de renome internacional, incluindo ainda diversas comunicações orais e em painel, pretendendo desta forma, divulgar os trabalhos científicos relevantes que têm vindo a ser desenvolvidos na área. Serão abordados, entre outros, os seguintes tópicos: Monómeros e polímeros de base biológica; Misturas, compósitos e híbridos de base biológica; *Bionanofillers* e nanocompósitos; Nano e microencapsulação; Polímeros funcionais; Biodegradação, avaliação do ciclo de vida e segurança ambiental.

[gcnpc@ipb.pt](mailto:gcnpc@ipb.pt)  
[www.gcnpc.ipb.pt](http://www.gcnpc.ipb.pt)



International Symposium on Synthesis and Catalysis

ÉVORA  
September 2-4

#### International Symposium on Synthesis and Catalysis 2015 (ISySyCat2015)

O International Symposium on Synthesis and Catalysis 2015 (ISySyCat2015) decorrerá em Évora de 2 a 4 de Se-



**20 – 22 Abril 2015 em Chicago, USA**

Nanoparticle Synthesis and Assembly  
 events@rsc.org  
 www.rsc.org/ConferencesAndEvents/RSCConferences/  
 FD/Nanoparticle-FD2015/

**3 – 7 Maio 2015 em La Rochelle, França**

3<sup>rd</sup> International Symposium on Green Chemistry  
 (ISGC 2015)  
 contact@isgc2015.com  
 www.isgc2015.com

**28 – 31 Maio 2015 em Mykonos, Grécia**

2<sup>nd</sup> International Conference on Food and Biosystems En-  
 gineering (FaBE 2015)  
 fabe-conference@fabe.gr  
 www.fabe.gr

**10 – 12 Junho 2015 em Lisboa**

6<sup>th</sup> European Conference on Chemistry for Life Sciences  
 (6<sup>th</sup> ECCLS)  
 6eccls@chemistry.pt  
 www.6eccls.eventos.chemistry.pt/

**21 – 25 Junho 2015 em Genebra, Suíça**

42<sup>nd</sup> International Symposium on High Performance Li-  
 quid Phase Separations and Related Techniques  
 hplc2015@symporg.ch  
 www.hplc2015-geneva.org/

**21 – 26 Junho 2015 em Dresden, Alemanha**

European Polymer Federation Congress 2015 (EPF-2015)  
 s.kirrwald@gdch.de  
 www.epf2015.org

**22 – 24 Junho 2015 em Aveiro**

Third International Congress on Cocoa Coffee and Tea  
 (CoCoTea 2015)  
 www.cocotea2015.com

**23 – 26 Junho 2015 em Sevilha, Espanha**

7<sup>th</sup> Spanish-Portuguese-Japanese Organic Chemistry Sym-  
 posium  
 abel.ros@iiq.csic.es  
 www.7spjocs.com/

**28 Junho – 2 Julho 2015 em Barcelona, Espanha**

18<sup>th</sup> IUPAC International Symposium on Organometallic  
 Chemistry Directed Towards Organic Synthesis  
 (OMCOS 18)  
 jmartinez@iciq.es  
 www.omcos2015.com/

**1 – 3 Julho 2015 em Coimbra**

XXIV Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de  
 Química  
 eventos@spq.pt  
 xxivenspq.eventos.chemistry.pt

**4 – 9 Julho 2015 em Lille, França**

Congrès de la Société Chimique de France (SCF'15)  
 scf15@societechimiquedefrance.fr  
 www.societechimiquedefrance.fr/congres/scf-15/?lang=fr

**5 – 9 Julho 2015 em Bratislava, Eslováquia**

21<sup>st</sup> International Conference on Organometallic Chemis-  
 try (EuCOMC XXI)  
 eucomcxxi@guarant.eu  
 www.eucomcxxi.eu/

**5 – 10 Julho 2015 em Bordéus, França**

11<sup>th</sup> International Symposium on Ionic Polymerization  
 (IP'15)  
 ip15bordeaux@enscbp.fr  
 ip15.sciencesconf.org/

**14 – 17 Julho 2015 em Mezzocorona, Itália**

9<sup>th</sup> In Vino Analytica Scientia Symposium (IVAS2015)  
 ivas2015@fmach.it  
 eventi.fmach.it/IVAS2015/

**9 – 14 Agosto 2015 em Buxan, Coreia**

45<sup>th</sup> World Chemistry Congress (IUPAC-2015)  
 office@iupac2015.org  
 www.iupac2015.org/

**23 – 26 Agosto 2015 em Viena, Áustria**

15<sup>th</sup> European Conference on Solid State Chemistry  
 (15<sup>th</sup> ECSSC)  
 ecssc15@univie.ac.at  
 ecssc15.univie.ac.at/

**23 – 27 Agosto 2015 em Budapeste, Hungria**

63<sup>rd</sup> International Congress and Annual Meeting of the Socie-  
 ty for Medicinal Plant and Natural Product Research (GA)  
 ga2015@pharmacognosy.hu  
 ga2015.hu/

**2 – 4 Setembro 2015 em Évora**

International Symposium on Synthesis and Catalysis 2015  
 (ISySyCat2015)  
 isysycat@chemistry.pt  
 isysycat.eventos.chemistry.pt/

**6 – 10 Setembro 2015 em Viseu**

11<sup>th</sup> International Meeting of the Portuguese Carbohydrate  
 Group (Glupor 11) / 6<sup>th</sup> Iberian Carbohydrate Meeting  
 glupor11@chemistry.pt  
 glupor11.eventos.chemistry.pt/

**6 – 10 Setembro 2015 em Bordéus, França**

EUROANALYSIS XVIII  
 p.garrigues@ism.u-bordeaux1.fr  
 www.euroanalysis2015.com

**6 – 11 Setembro 2015 em Quioto, Japão**

XVIII International Sol-Gel Conference (Sol-Gel 2015)  
 solgel2015@kuchem.kyoto-u.ac.jp  
 kuchem.kyoto-u.ac.jp/solgel2015/

**9 – 12 Setembro 2015 em Aveiro**

International Conference on the History of Chemistry  
 (10<sup>th</sup> ICHC)  
 FIS-10ICHC@ua.pt  
 10ichc-2015.web.ua.pt/