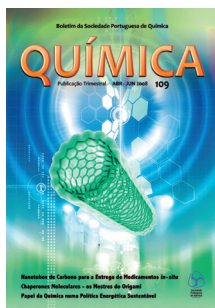


## BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA



**Propriedade de**  
Sociedade Portuguesa de Química  
ISSN 0870 – 1180  
Registo na DGCS n.º 101 240 de 28/9/72  
Depósito Legal n.º 51 420/91  
Publicação Trimestral  
N.º 109, Abril – Junho 2008

**Redacção e Administração**  
Av. da República, 45 – 3.º Esq.  
1050-187 LISBOA  
Tel.: 217 934 637  
Fax: 217 952 349  
bquimica@ist.utl.pt  
www.spq.pt

**Editor**  
Jorge Morgado

**Editores-Adjuntos**  
Palmira Silva  
Helder Gomes  
Carlos Folhadela

**Comissão Editorial**  
Hugh Burrows  
Joaquim L. Faria  
Ana Lobo  
M. N. Berberan e Santos  
A. Nunes dos Santos

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

**Grafismo**  
Paula Martins

**Execução Gráfica**  
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**  
1850 exemplares

**Preço avulso**  
€ 12,50  
Assinatura anual – quatro números  
€ 45,00  
(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 de  
"Química".  
São autorizadas e estimuladas todas as citações e  
transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem  
prejuízo da necessária autorização por parte do(s)  
autor(es) quando se trate de colaborações assinadas.  
A Orientação Editorial e as Normas de Colaboração  
podem ser encontradas nas páginas interiores  
deste fascículo.

**Publicação subsidiada pela**

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

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

EDITORIAL 2

### NOTICIÁRIO SPQ

Prémio Fererira da Silva 2008	3
Medalha Vicente de Seabra 2008	3
<i>Solvay &amp; Hovione Ideas Challenge</i>	4
IX Feira da Ciência de Madrid	5
4ª Edição das Olimpíadas de Química Júnior - Provas Regionais	7
Final Nacional das Olimpíadas de Química Júnior 2008	13

### LIVROS & MULTIMÉDIA

Desactivação e Regeneração de Catalisadores	15
---	----

### NOTICIÁRIO ESCOLAS

3º Encontro do Instituto D. João V - Vida Saudável e Gastronomia	17
---	----

### QUÍMICA E ENSINO

Manuais de Química para o 3º ciclo e ensino secundário	19
Os Detectives Químicos nas Olimpíadas de Química 2008 - IST <i>Leonel Silva, Raquel Dias e Palmira F. Silva</i>	21

Sugestão para uma Actividade Prática de Laboratório sobre Oxidação-Redução <i>Mário Valente e Helena Moreira</i>	25
--	----

### ARTIGOS

<i>Chaperones</i> Moleculares - Os Mestres do Origami <i>Paula C. Ramos, Ana C. Matias e António J. Marques</i>	31
--	----

Libertação Controlada de Iodeto de Cobre Encapsulado em Nanotubos de Carbono <i>Pedro M.F.J. Costa e Dmitri Golberg</i>	41
---	----

Uma Revisão da Bibliografia sobre o Ensino da Química Verde <i>Dominique A. Costa, M. Gabriela T.C. Ribeiro e Adélio A.S.C Machado</i>	47
---	----

### QUÍMICA E SOCIEDADE

Química e Energia - O Papel das Ciências Químicas na Política Energética Europeia <i>Relatório elaborado pelo grupo de trabalho "Química e Energia" da EuCheMS</i>	53
--	----

### DESTAQUES

61

### AGENDA

64



**JORGE MORGADO**  
 bqimica@ist.utl.pt  
 www.spq.pt

O Verão traz consigo, não apenas as férias escolares, mas sobretudo um dos períodos de maior apreensão para alunos e pais/encarregados de educação.

São divulgados os resultados da avaliação, em particular no que se refere aos exames nacionais e ao acesso ao ensino superior.

Continuam as discussões em relação ao sucesso/insucesso escolar; os exames nacionais e o seu grau de dificuldade; estatísticas e modo de acesso ao ensino superior. E, ainda, o grau de preparação dos alunos que entram para as Universidades e Institutos Politécnicos com a legítima ambição de conseguir um diploma.

Tudo isto usado, muitas vezes, como arma de combate político, e enquadrado num panorama económico-social mais amplo. Pelo facto de as consequências sobre política de ensino serem de longo termo (muito mais do que os ciclos governativos de 4 anos...), estas deveriam ser alvo de acordos políticos mais alargados, deixando que elas se implementassem e fosse possível avaliar as suas implicações.

Não é claro que, com a actual separação entre o Ministério da Educação (ME) e o Ministério da Ciência Tecnologia e Ensino Superior, exista uma comunhão de objectivos entre eles. Nos últimos anos, o abandono escolar e a média das classificações obtidas nos exames nacionais e nas provas globais são as métricas mais relevantes para o ME. O primeiro objectivo é importante, porque se pretende manter os alunos num meio escolar, garantindo a universalidade de uma formação mínima, procurando, desta forma, evitar o seu lançamento precoce no mercado de trabalho e a minimização de problemas sociais como a exclusão e a delinquência. A segunda métrica tem sido usada como arma política de validação das políticas educativas. Quando se comparam médias obtidas por cada disciplina ao longo de vários anos, para daí concluir da evolução do sucesso de aprendizagem, nem sempre se pondera, adequadamente, o efeito da comparabilidade das provas. Transparece, aliás, que algumas das medidas recentes do ME se destinam a aumentar estas métricas, sem que isso corresponda, efectivamente, a uma melhoria do grau de assimilação, pe-

los alunos, dos conteúdos e conceitos. Esta segunda implicação é a que tem maior reflexo no ensino superior. Um aumento de médias origina um maior grau de ocupação de vagas disponíveis (em particular nos casos em que a nota mínima de acesso é superior a 10/20 valores), mas não corresponde, necessariamente, a uma população de estudantes mais bem preparada.

Aliás, as notas de acesso a alguns cursos, de que Medicina continua a ser o caso paradigmático, estão cada vez mais desfazadas de uma realidade que se pretende de aferição da capacidade/preparação dos alunos para neles ingressarem. O facto de as notas das disciplinas, para efeito de acesso ao ensino superior, serem mantidas durante 3 anos, tem três consequências: muito poucos alunos conseguem entrar no ano em que concluem o 12º ano, face a um inflacionamento dessas notas; há muitos alunos que vão melhorando as notas de uma ou mais disciplinas durante esses três anos, até que a média final lhes permita a entrada; há alunos que se inscrevem em cursos superiores (“cursos trampolim”) para obter uma melhor preparação nalgumas disciplinas básicas e depois, ou por via da repetição de provas de acesso ou por via de transferência, acederem ao curso pretendido. Cria-se assim um “limbo” que retém os alunos por períodos de até 3 anos.

A resolução destes e de outros problemas do Ensino requerer mais algumas iterações. Esperamos que este processo seja convergente para bem dos futuros agentes do desenvolvimento português e da sociedade portuguesa em geral.

Neste número do QUÍMICA pode encontrar uma resenha das várias actividades “Olimpicas” de Química que decorreram no início deste ano, e que mostram o dinamismo e capacidade de mobilização da SPQ e de muitos Professores e alunos que nelas participam.

Há vários artigos, dos quais destaco um sobre a actividade dos “Chaperones” moleculares, onde se desvenda parte do véu que é o seu papel na actividade das proteínas; um artigo da área da nanotecnologia em que se estuda a libertação controlada de iodeto de cézio encapsulado em nanotubos de carbono – dão-se os primeiros passos numa área que pode ter grandes implicações, por exemplo, na medicina, servindo estes nanotubos como veículos de transporte e de libertação controlada, *in situ*, de fármacos. Numa época em que a dependência do petróleo, com o quase contínuo aumento dos preços dos combustíveis, e as alterações climáticas assumem um carácter resolutório de urgência, apresenta-se um conjunto de recomendações da EuCheMS (e qual o papel dos Químicos para as concretizar) para ajudar a UE a responder ao compromisso assumido de reduzir o impacto da actividade humana sobre as alterações climáticas e sobre uma eficiente produção e uso de energia.

Boa Leitura e Boas Férias!

## PRÉMIO FERREIRA DA SILVA 2008

O Prémio Ferreira da Silva de 2008 foi atribuído pela SPQ à Professora Doutora Sílvia Marília de Brito Costa, Professora Catedrática do Instituto Superior Técnico, IST, atendendo à qualidade da sua investigação científica, assim como à sua projecção, tanto a nível nacional como internacional, e à sua contribuição para a criação de uma escola de fotoquímica molecular.

A Professora Sílvia Costa licenciou-se em Engenharia Química no IST, em 1964, tendo obtido o seu doutoramento na Universidade de Southampton, Reino Unido, em 1970. Realizou um pós-doutoramento na *Royal Institution*, Londres, em 1971/72, após o que regressou ao IST como Professora Auxiliar (1972-1978), passando depois a Professora Associada (1978-

-1980) e, desde 1980, a Professora Catedrática.

A Professora Sílvia Costa contribuiu de modo muito significativo para o desenvolvimento da fotoquímica molecular no IST. Foi orientadora de treze teses de doutoramento, sendo muitos desses doutorados actualmente professores no topo da carreira docente universitária em várias universidades portuguesas. A sua produção científica abrange mais de 150 publicações em revistas internacionais com arbitragem e um número igualmente elevado de comunicações em conferências. O trabalho do seu grupo de investigação tem tido um impacto científico relevante, tanto a nível nacional como internacional, constituindo uma referência na área da fotoquímica molecular, tendo continuado a abrir novos caminhos e

a explorar novas ideias nas fronteiras da ciência. Tem sido convidada para proferir conferências em universidades e reuniões científicas nacionais e internacionais de renome, contribuindo para o prestígio e divulgação da ciência portuguesa.

A atribuição do Prémio Ferreira da Silva à Professora Sílvia Marília de Brito Costa constitui um justo reconhecimento, pela Sociedade Portuguesa de Química, da sua contribuição para o desenvolvimento da Ciência em geral, e da Química que se produz em Portugal, em particular.

José Luís Figueiredo

## MEDALHA VICENTE DE SEABRA 2008

A Medalha Vicente de Seabra 2008 foi atribuída pela SPQ ao Doutor Manuel Fernando Ribeiro Pereira, Professor Auxiliar da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, FEUP.

O Doutor Manuel Fernando Ribeiro Pereira concluiu a Licenciatura em Engenharia Química na FEUP em 1994, e o Doutoramento em 1998, também na FEUP. Durante cerca de três anos esteve no CITEVE, Centro Tecnológico das Indústrias Têxtil e do Vestuário de Portugal, onde foi Coordenador da Unidade de Planeamento e Controlo de I&DT, tendo depois ingressado no corpo docente da FEUP, inicialmente

como Professor Auxiliar Convocado. Actualmente é Professor Auxiliar no Departamento de Engenharia Química e investigador do Laboratório de Catálise e Materiais, Laboratório Associado LSRE-LCM, onde a sua principal área de investigação está centrada no desenvolvimento de materiais de carbono para aplicações em adsorção e catálise ambiental. Foi coordenador de cinco projectos de investigação financiados (ADI, FCT, EU), co-orientou um doutoramento, orientou dois Mestrados, dois alunos ERASMUS, três estágios industriais e orienta actualmente dois doutoramentos. Tem cerca de 40 publicações em revistas internacionais

com mais de 600 citações, entre as quais se destaca o trabalho que actualmente é o *Top Paper for Portugal in Chemistry (ISI Web of Knowledge, Essential Science Indicators)*: Carbon **37** (1999) 1379-1389.

A atribuição da Medalha Vicente de Seabra traduz o reconhecimento pela SPQ da elevada qualidade, originalidade e autonomia do trabalho de investigação em Química desenvolvido em Portugal por um investigador de idade não superior a 40 anos.

José Luís Figueiredo

## CURIOSIDADES - PINGUINS EM MARTE ?

Deveríamos procurar pinguins em Marte em vez de pequenos homens verdes?

Assim começa uma notícia recentemente publicada na revista *Nature* (de 27 de Junho) a respeito das últimas descobertas da missão Phoenix em Marte. Este planeta parece ser aquele que melhores condições reúne para o desenvolvimento de vida e, pela sua (relativa) proximidade, tem sido rece-

centemente alvo de interesse. A sonda Phoenix, lançada em 4 de Agosto de 2007, aterrou na superfície de Marte em 25 de Maio. Esta missão tem por objectivos, entre outros, a pesquisa da presença de água e avaliar da possibilidade de Marte poder suportar vida. Depois da descoberta de água sob a forma de gelo um pouco abaixo da superfície, o solo tem sido alvo de vários estudos, recorrendo a um

analisador que combina microscopia, electroquímica e condutividade. Os resultados mostram que o solo é alcalino (pH≈8 ou 9) e que contém vários iões, como magnésio, sódio, potássio e cloreto. Parece de facto assemelhar-se ao solo da Antártica, apresentando características necessárias ao desenvolvimento de vida, embora não haja hipótese de encontrar qualquer ser vivo.

**SHIC'08**  
**SOLVAY & HOVIONE IDEAS CHALLENGE**  
**IDEIAS COM VALOR**

**PRÉMIO SOLVAY**  
 ENGENHARIA QUÍMICA  
 QUÍMICA  
 MATERIAIS  
 AMBIENTE

**PRÉMIO HOVIONE**  
 QUÍMICA FINA  
 DESENVOLVIMENTO FARMACÊUTICO

CANDIDATURAS  
**01.02.08 > 30.09.08**

**www.shic2008.com**

SOLVAY

HOVIONE

PARCEIROS

SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

OF  
 ORDEN DOS FARMACÊUTICOS

adi  
 agência de inovação

Foi assinado em Janeiro um protocolo entre a SPQ e as empresas Solvay Portugal e a Hovione para a promoção do Prémio *Solvay&Hovione Ideas Challenge (SHIC'08)*.

A iniciativa SHIC'08 visa promover a

inovação no País, posicionar aquelas empresas industriais como parceiros activos do meio académico e distinguir projectos susceptíveis de gerar valor nas áreas da engenharia química, química, materiais, ambiente, química fina e desenvolvimento far-

macêutico.

O concurso, cuja candidatura decorre entre 1 de Fevereiro e 30 Setembro, conta com o apoio da Sociedade Portuguesa de Química, do Colégio de Engenharia Química da Ordem dos Engenheiros, do Colégio de Especialidade em Indústria Farmacêutica da Ordem dos Farmacêuticos e da Agência de Inovação, entidades com as quais foram celebrados protocolos de cooperação.

Serão atribuídos dois prémios no valor de 10 mil euros cada (cinco mil a título pecuniário e o restante como financiamento imediato do projecto) e às candidaturas vencedoras serão proporcionadas oportunidades de contacto privilegiado com a comunidade empresarial.

O SHIC'08 será aberto a projectos inovadores em duas plataformas:

- O prémio Solvay distinguirá ideias, produtos ou processos inovadores preferencialmente nas áreas dos produtos de base inorgânica, electroquímica e química do cloro e flúor, peroxidados e detergentes, polímeros, energias renováveis, química sustentável e electrónica.
- O prémio Hovione orienta-se para a inovação na produção em "batch", novos métodos na produção industrial de APIs (*Active Pharmaceutical Ingredients*), química verde com aplicação na produção de APIs, supergenéricos, engenharia de partículas, nanotecnologia e inalação pulmonar.

O concurso destina-se a docentes, investigadores e estudantes de universidades e institutos públicos, devendo as candidaturas ser formalizadas através do *website* [www.shic2008.com](http://www.shic2008.com). O júri de avaliação, composto por personalidades de reconhecido mérito e por representantes das duas empresas e dos parceiros institucionais, divulgará a sua selecção em sessão pública prevista para Novembro.



Representantes das empresas patrocinadoras e dos parceiros institucionais do Projecto SHIC'08. Ordem da esq. para dir.: Prof. Mário Berberan Santos, Vice-Presidente da Sociedade Portuguesa de Química; Eng. António Salvador Pinheiro, Presidente do Colégio de Engenharia Química da Ordem dos Engenheiros; Dr. Guy Villax, CEO da Hovione; Eng. Basílio García-Pañuela, Director da Fábrica da Solvay Portugal; Dr. Paulo Sá e Cunha, Vice-Presidente da Agência de Inovação; Dr. Paulo Amaral, Vogal do Colégio da Indústria da Ordem dos Farmacêuticos.

## IX FEIRA DE CIÊNCIA DE MADRID



Decorreu em Madrid, de 24 a 27 de Abril, no parque de feiras IFEMA, a IX Feira de Ciência de Madrid – “Madrid es Ciencia”.

A Feira de Ciência de Madrid é um evento de divulgação da Ciência de grande dimensão, que nesta edição ocupou dois pavilhões do IFEMA, numa área total de cerca de 28.000 m<sup>2</sup>, com mais de duas centenas de expositores e cerca de 600 actividades interactivas, e que ultrapassou a média de 40.000 visitantes diários (mais de 160.000 entradas registadas).

Este ano, Portugal aparecia no programa da Feira como país convidado, tendo estado representado pelo “Ciência Viva” – Agência Nacional para a Cultura Científica e Tecnológica. Ocupando um espaço de cerca de 50 m<sup>2</sup> num local central da Feira, a representação de Portugal teve como destaques especiais as actividades “A Cozinha é um Laboratório” e “Química por Tabela”, ambas concebidas por sócios da SPQ, docentes do Departamento de Química da Universidade de Aveiro, para a Fábrica Centro Ciência Viva de Aveiro.

O “Química por Tabela”, além de ter estado em demonstração contínua durante os quatro dias, foi apresentado na sua versão de espectáculo no auditório da Feira. A representação portuguesa incluiu ainda “Hologramas desenhados à mão” (actividade desenvolvida pelo Departamento de Física da Universidade de Aveiro e que obteve um prémio internacional

de comunicação de ciência), “Mãos no Gelo”, “Quem é o Assassino?” e “Jogos Matemáticos”.

De acordo com a directora do Ciência Viva, Ana Noronha, a organização da Feira fez questão de referenciar muito positivamente a participação de Portugal, destacando-a como a melhor de país convidado de sempre, pela qualidade e profissionalismo da representação e pelo cuidado que a equipa teve em interagir e fazer-se entender pelo público.

A IX Feira de Ciência de Madrid contou com a participação de um número elevado de universidades e institutos de ensino superior – com evidente preocupação na divulgação dos seus cursos e na captação de futuros alunos – assim como diversas empresas, entidades públicas regionais e nacionais, museus e organizações não governamentais. No entanto, muita da riqueza e diversidade da Feira

resulta da já habitual participação de um elevado número de escolas, cuja representação é assegurada por equipas empenhadas de alunos de todas as idades [a Comunidade Autónoma

de Madrid apoia financeiramente a participação das escolas e concede dispensa de aulas durante os dois dias úteis da Feira]. Embora sem a imagem profissional e os meios pro-

mocionais das empresas, as escolas destacam-se pela criatividade dos temas propostos e pelo empenho e rigor dos seus “cientistas de palmo e meio”.



“Química por Tabela” é uma actividade da Fábrica criada com base no trabalho de Paulo Ribeiro Claro e Brian Goodfellow do Departamento de Química da Universidade de Aveiro onde, a partir de uma sequência de reacções químicas visualmente apelativas, surpreendentes, ou mesmo espectaculares, conjugadas com artes cénicas de luz e som, se proporcionam momentos de comunicação de ciência.



“A Cozinha é um Laboratório” é uma actividade da Fábrica que convida a descobrir a ciência e a tecnologia que existe em espaços tão familiares como a cozinha das nossas casas. É o local onde “pôr as mãos na massa” encontra a sua aplicação mais literal. Observando e testando, o visitante fica a conhecer melhor os processos subjacentes às transformações químicas e bioquímicas que ocorrem nos alimentos quando os preparamos.

A Feira de Ciência de Madrid é um evento que representa bem a importância da promoção e divulgação da Ciência na Sociedade actual – uma Sociedade fortemente marcada pelo desenvolvimento científico-tecnológico, na qual o conhecimento científico tem um papel fundamental.

Um papel fundamental não apenas em termos profissionais – o emprego qualificado é o que mais cresce em Portugal –, mas na própria compreensão do mundo que nos rodeia, e no exercício activo e responsável da cidadania.

O despertar da vocação científica entre os mais jovens e da curiosidade científica entre todos é um trabalho que não deve ser desprezado.

A Feira de Ciência de Madrid tem também a capacidade de mostrar a

ciência “escondida” nos objectos e actividades do dia-a-dia.

E, neste contexto, merece menção o facto de a Química estar presente um pouco por toda a Feira: para além da participação portuguesa, fortemente marcada pelas actividades de química, foi possível assistir a experiências e demonstrações de química em quase todos os expositores das Universidades (estes com muitas experiências “clássicas”, que é possível observar um qualquer demonstração de química nas universidades portuguesas) e diversos expositores institucionais salientavam o papel da química nas suas actividades: tratamento de água, novos materiais, energia, etc... e em muitas escolas – estas últimas com diversos espaços dedicados à química surpreendente, como “*Magia parece, Química es*”, ou

“*Química electrizante*” – e à química à nossa volta, como “*El químico e el bombero frente al fuego*”, “*las dolzuras de la ciencia*”, ou “*El agua: la gran desconocida*”...

Paulo Ribeiro Claro participou na IX Feira de Ciência de Madrid a convite da Fábrica Centro Ciência Viva, como co-autor da actividade “Química por Tabela”

## 4ª EDIÇÃO DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR\_PROVAS REGIONAIS

### UNIVERSIDADE DO MINHO

O Departamento de Química da Universidade do Minho (UM) organizou, pela quarta vez consecutiva, as *Olimpiadas de Química Júnior* (OQJ) em colaboração com a SPQ. No passado dia 19 de Abril de 2008 estiveram presentes no Campus de Gualtar, em Braga, 240 alunos provenientes de 40 escolas da região, organizados em 80 equipas, acompanhados por 66 professores, o que constituiu um número recorde de participantes.

Após uma curta cerimónia de boas vindas a todos os participantes, as provas tiveram início às 10h30 e decorreram nos laboratórios de ensino do Departamento de Química e no Anfiteatro do Complexo Pedagógico I. Durante cerca de duas horas e trinta minutos, as 80 equipas responderam a 41 questões na prova de laboratório, baseadas em situações e montagens experimentais e a outras 25 questões na prova de anfiteatro, baseadas em situações apresentadas com recurso a meios audiovisuais.

Enquanto os alunos estavam atarefa-

dos na realização das provas, os Professores acompanhantes participaram na sessão “Actividades Experimentais para Professores”. Foi com agrado e muito entusiasmo que os docentes participantes acolheram esta iniciativa.

Seguiu-se o almoço na cantina e um passeio pelo Campus de Gualtar com visita às instalações desportivas. Pelas 15h00, enquanto a equipa de correcção das provas trabalhava intensamente, todos os participantes tiveram oportunidade de assistir a três mini-palestras. Na primeira, “Química: uma carreira!” (Doutor João Paulo André) foi apresentado o percurso académico conducente a uma carreira profissional na área da Química. Seguidamente foram apresentadas as comunicações: “Polímeros: amigos ou inimigos do ambiente?” (Doutora Gabriela Botelho) e “Chocolate: uma doce magia” (Doutora Ana Paula Esteves). Foram sorteados alguns brindes entre todos os alunos participantes (T-shirts, pin’s e caixas de modelos moleculares) e os Professores acompanhantes (livros de Química). A divulgação dos resultados, momento alto das OQJ, aconteceu por volta das 16h00. A **Medalha de Ouro** foi

atribuída à equipa constituída pelas alunas Raquel Portela, Bárbara Barbosa e Sílvia Gonçalves, e a **Medalha de Prata** foi entregue à equipa dos alunos Mafalda Araújo, José Ribeiro e José Rodrigues, ambas do Externato Delfim Ferreira, Vila Nova de Famalicão. A **Medalha de Bronze** foi para a equipa dos alunos Sónia Alves, André Ferreira e Vitor Silva, da Escola EB 2,3 de Briteiros, Guimarães. Para além das medalhas da SPQ, estes alunos foram presenteados pelo Departamento de Química da UM com leitores de MP4 (1º prémio), leitores de MP3 (2º prémio) e *flash drives* (3º prémio). Após o encerramento, foi oferecido um lanche aos alunos.

Este evento contou com o patrocínio de oito empresas. A cobertura das OQJ foi feita pelos principais órgãos de comunicação social da região e as fotos do acontecimento estão disponíveis em [www.uminho.pt](http://www.uminho.pt) no item *Comunicação, Fotos*.

A Comissão Organizadora das OQJ 2008 na Universidade do Minho



Equipa vencedora das OQJ 2008 na Universidade do Minho, constituída pelas alunas Raquel Portela, Bárbara Barbosa e Sílvia Gonçalves, do Externato Delfim Ferreira, acompanhada pela Prof. Cristina Alves



Perspectiva do Anfiteatro na sessão de abertura das OQJ 2008 na UM

## FACULDADE DE CIÊNCIAS UNIVERSIDADE DO PORTO

A quarta edição das Olimpíadas de Química Júnior, 2008, realizou-se, mais uma vez, nas instalações do Departamento de Química da Faculdade de Ciências, da Universidade do Porto, no passado dia 19 de Abril de 2008, cabendo a sua organização a docentes deste Departamento.

Concorreram para participar nesta prova 33 escolas, tendo comparecido 32 escolas / 96 estudantes dos 8º e/ou 9º anos. Cada equipa estava acompanhada por um professor da respectiva escola.

Após uma breve recepção informal, iniciaram-se as provas, compostas por algumas questões de carácter teórico, que decorreram num anfiteatro, e outras de carácter mais experimental, montadas em cinco laboratórios.

As equipas foram distribuídas por dez grupos acompanhadas por guias, alunos de Licenciatura em Química.

A par das provas para os alunos, foi proporcionada a possibilidade de os seus professores participarem num Workshop subordinado ao tema: *Actividades laboratoriais para o ensino básico*.

Terminadas as provas houve um almoço na Cantina.

De tarde realizou-se uma sessão de Experiências de Salão, realizada por um recém licenciado do Departamento, que cativou a atenção de todos os presentes.

Seguiu-se o tão ansiado momento da divulgação dos resultados e distribuição dos prémios. A todos os alunos concorrentes e respectivos professores foram entregues prémios.

Foram distribuídos diplomas de participação a todos os jovens e respectivos professores, bem como aos alunos do Departamento de Química que colaboraram no evento. Os vencedores, que receberam as medalhas da SPQ para o evento, foram: **1º** - EBI / JI Barranha: Ana Raquel Castro, Maria Rosário Miranda e Miguel Boaventura Gomes; **2º** - E.S. Castelo da Maia: Francisco Paiva, José Henrique Silva e Pedro Filipe Patoilo; e **3º** - Colégio dos Cedros: Afonso Espregueira, Bernardo Dias e Miguel Carvalho.

Para comemorar o final deste dia, que achamos ter sido do agrado de todos, foi oferecido um lanche no bar da Fauldade.

Não podemos deixar de agradecer à Reitoria da U.P. o apoio dado a esta iniciativa, bem como à Porto Editora.

Ana Maria Melo Ventura Reis  
Prof.<sup>a</sup> Auxiliar FCUP

Maria Agostinha Matos  
Presidente DQFCUP



## UNIVERSIDADE DE AVEIRO

A edição de 2008 das Olimpíadas de Química Júnior decorreu no passado dia 19 de Abril. Apesar de o dia ter começado chuvoso, os jovens participantes chegaram cheios de entusiasmo para um dia que prometia ser divertido. Foi talvez por esta animação contagiante, que o Sol apareceu para homenagear durante o resto do dia, estes futuros aspirantes a “Cientistas”. Compareceram 78 equipas (234 alunos), oriundas de 28 Escolas, que realizaram um conjunto de 3 provas - incluindo demonstrações de “Química em Espectáculo!!!” e as tradicionais “questões de observar e mexer” em Laboratório, que são a imagem de marca das Olimpíadas de Química Júnior. Pena é que não tenhamos possibilidade (por limitações de espaço) de acolher todos os alunos que se propuseram a participar nestas provas: os candidatos às Olimpíadas de Química Júnior 2008, em Aveiro, foram mais de 300. Para os que não puderam vir relembramos que em 2009 haverá nova edição das Olimpíadas Júnior.

As equipas vencedoras desta edição de 2008 foram as seguintes: **Medalha de Ouro:** Miguel Silva, Lucas Jorge e Pedro Tomé; da Escola Secundária José Estevão – Aveiro (Professor acompanhante: José Alberto Costa); **Medalha de Prata:** Fábio Barbosa, Jessica Ferreira e Maria Eduarda Mota; do Colégio Frei Gil-Instituto de Promoção Social da Bairrada-Bustos, (Professor acompanhante: Marisol Moreira); **Medalha de Bronze:** João Santos, David Almeida e Cristiana Silva; da Escola Secundária Evaristo Nogueira – S. Romão, (Professores acompanhantes: Cristina Albino e Go-rete Mendes).

O programa desta edição incluiu ainda as já obrigatórias actividades preparadas para os professores acompanhantes – este ano os professores puderam acompanhar uma sessão de “Química em Espectáculo” e participar numa sessão laboratorial sob o tema “Cromatografia”.

Este conjunto de actividades só foi possível com a mobilização dos do-

centes e a participação activa e entusiasta dos estudantes do Departamento de Química. De facto, e tal como nos anos anteriores, as Olimpíadas de Química Júnior 2008 resultaram do esforço conjunto de uma equipa que reuniu 10 docentes e 42 estudantes - de licenciatura, mestrado e doutoramento - envolvidos nas diversas tarefas do dia: monitores dos grupos de concorrentes (assegurado pelo Núcleo de Estudantes de Química), apoio a provas laboratoriais, apoio às demonstrações “Química em Espectáculo!!!”, correcção das provas e apoio às actividades para os professores.

Um verdadeiro trabalho de equipa!

Os jovens participantes tiveram a oportunidade de beneficiar de uma visita ao Campus Universitário, guiada e animada pelos alunos de licenciatura/monitores do Núcleo de Estudantes de Química. Foi uma visita muito animada, recheada de histórias e comentários, que só o espírito jovem de alunos de licenciatura pode proporcionar. Soube bem este momento de relaxe no final de um dia de provas, enquanto esperavam pela cerimónia de encerramento, e pelo lanche que prometia ser apetitoso.

É com este espírito de entusiasmo e com toda a satisfação que o Departamento de Química da Universidade de Aveiro renova a colaboração com a Sociedade Portuguesa de Química para a realização das Olimpíadas de Química Júnior 2009, cuja data e programa serão divulgados oportunamente.

## UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR

No departamento de Química da UBI, no dia 19 de Abril, decorreram as Olimpíadas de Química Júnior 2008. Este evento foi da responsabilidade de docentes deste departamento: Maria de Lurdes Franco Ciríaco, Maria José Alvelos Pacheco e Maria Helena dos Santos Bandeira Nunes, tendo a colaboração de outros docentes, técnicos e alunos do Departamento. Este ano o número de escolas e alunos participantes aumentou significa-

tivamente, relativamente aos anos anteriores, englobando uma maior área geográfica. O número de escolas que realizou pré-inscrição foi de 14, tendo 13 feito a inscrição e 11 participado. O número de equipas que realizaram provas foi de 51.

As Olimpíadas constaram de duas provas, uma de sala e outra de bancada. A prova de sala continha 50 questões de escolha múltipla apresentadas em *power-point*, tendo os alunos 45 segundos por diapositivo; a prova de bancada constou de 13 experiências/observações tendo a sua duração sido cronometrada, uma vez que se estabeleceu que em situação de empate usar-se-ia como critério de desempate o tempo de prova de bancada.

Enquanto os alunos prestavam provas, e como estavam a decorrer na UBI as Jornadas de Química Industrial, os professores foram convidados a participar em palestras. Os temas e oradores foram: “Produção de bio-etanol a partir de resíduos florestais” pela Dr<sup>a</sup> Susana Ferreira e “Biomassa Energia” pelo Eng<sup>o</sup> Santino Di Bernardino. Os professores e alunos participantes tiveram ainda oportunidade de efectuar uma visita ao Museu de Lanifícios da UBI, na parte da tarde, enquanto esperavam pela divulgação dos vencedores da Prova.

Este ano os vencedores da prova Regional realizada na UBI foram: **1º lugar** - Escola Cidade de Castelo Branco; Mafalda Isabel Galhofo, João Miguel Brás e André Alexandre Afonso; **2º lugar** - Escola Básica dos 2º e 3º Ciclos Serra da Gardunha – Fundão, Maria João Oliveira Carvalho, João Miguel Castanheira e Telmo Galvão Pereira; **3º lugar** – Escola Secundária Mouzinho da Silveira – Portalegre, Ana Brito, Inês Figueiredo e Diogo Pacheco.

As equipas dos 1º e 2º lugares ficaram apuradas para a prova Nacional das Olimpíadas de Química Júnior de 2008 a realizar, dia 10 de Maio, na Universidade do Porto.

## UNIVERSIDADE DE COIMBRA

A Decorreram em Coimbra, no passado dia 19 de Abril, no Departamento de Química da Universidade de Coimbra, as quartas Olimpíadas de Química Júnior (OQJ). Este ano, a adesão a esta iniciativa superou todas as expectativas com a inscrição de 29 escolas e mais de 200 alunos de vários distritos em torno de Coimbra. O número de escolas e alunos presentes em Coimbra foi um pouco inferior mas foi ainda assim um grande dia.

A prova foi organizada de forma semelhante aos anos anteriores tendo sido dividida em quatro partes (todas de igual peso na classificação final): três partes práticas (com 10 actividades diferentes) que decorreram em três laboratórios distintos e uma quarta, teórica, com temporização e perguntas de resposta de escolha múltipla, projectadas em "Data Show".

Terminada a prova houve tempo para o merecido almoço. Seguiu-se um seminário sobre Gastronomia Molecular, proferido pela Doutora Paulina Mata, onde alunos e professores aprenderam a química existente na cozinha e puderam pôr as mãos na confecção de um gelado com azoto líquido tendo no final tido a oportunidade de saborear o resultado da sua experiência química.

O maior número de alunos não fez diminuir a sua qualidade e entusiasmo e, mais uma vez, foram todos vencedores, pois obtiveram classificações situadas entre os 55% e os 80%. E como medalhados tivemos: **1º lugar** - Escola Básica 2,3 Frei Estêvão Martins, Alcobça, Bernardo Figueiredo, Catarina Correia, João Pereira, Professor: Desidério Carreira Pires; **2º lugar** - E. B. 2,3/S Eng.º Dionísio Augusto Cunha, Canas de Senhorim, Ana Dias, Ivo Rocha, João Martins, Professor: Maria Teresa Castro Melo de Almeida; **3º lugar** - Instituto D. João V, Lourical, Dora Ribeiro, Gonçalo Costa, Raquel Mota, Professoras: Clementina Maria, Isabel Oliveira.

Mais uma vez este foi um dia de festa; a festa da química! Um dia diferente e

bem passado entre estudantes de várias idades. No final das provas o sentimento geral entre os alunos era de que já tinha valido a pena, independentemente do resultado. Este ano os resultados foram aguardados ainda com mais ansiedade pois para além da recompensa imediata, as duas primeiras equipas iriam a uma final nacional. Para muitos dos jovens foi o primeiro contacto com a Universidade e por certo um factor de motivação para eventual escolha em ciências e tecnologia.

Por último, mas não menos importante, gostaríamos de agradecer às entidades patrocinadoras, salientando que o fulcral apoio dos patrocinadores se tem mantido durante estes 3 anos:

### Patrocínios:

Reitoria da Universidade de Coimbra; direcção da FCTUC (através do protocolo com o BPI); banco BPI; Departamento de Química da FCTUC.

### Apoios:

Porto Editora, FNAC-Coimbra, Câmara Municipal de Coimbra, Casa Municipal da Cultura de Coimbra.

E como por detrás do que se vê existem sempre muitos outros a fazer com que tudo funcione, aqui ficam os nomes de todos aqueles com participação directa na organização destas OQJ de Coimbra (sem qualquer ordem alfabética ou hierárquica porque todos, à sua maneira, foram importantes):

Maria João Moreno, Jorge Costa Pereira, Dina Murtinho, Patrícia Martins, Filipe Gomes, João Pina, Telma Costa, Rui Nunes, Raquel Rondão, Catarina Cabral, Carlos Serpa, Luís Estronca, Jorge Pereira, Gambusas, Tiago Santos, Renato Cardoso, Nuno Gonçalves, Catherine Castro, Cláudia Moniz, Gonçalo Sá, Liliana Martelo, Luis Veloso, Bruna, Catarina de Jesus, Ana Lapinha e J. Sérgio Seixas de Melo.

J. Sérgio Seixas de Melo  
Maria João Moreno

## INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO UTL

A edição das Olimpíadas da Química que decorreu no Instituto Superior Técnico foi uma demonstração prática de como a química pode ser divertida.

Às 10 h, depois de uma recepção em que o funcionamento da prova foi explicado, as 27 equipas - 84 alunos oriundos de 11 escolas -, divididas em quatro grupos, iniciaram as provas conduzidas por alunos de licenciatura do DEQB que os guiaram numa viagem pelo mundo da Química.

Os grupos azul, verde, rosa e laranja, foram conduzidos ao longo de cerca de 2h30min por três laboratórios e um anfiteatro onde responderam aos vistos de entrada na Química e Cidadania, Caça ao Químico, Química em Acção e Rally Químico.

Enquanto os alunos aplicavam os conhecimentos apreendidos, os professores acompanhantes participavam num debate muito animado sobre o ensino da Química no ensino básico e secundário com as professoras do IST Ana Maria Rego e Cristina Fernandes e a vice-reitora da UTL Prof. Helena Pereira.

Acabadas as provas e o debate, seguiu-se um almoço oferecido pela reitoria da UTL na cantina do Técnico após o que os guias conduziram os participantes numa visita ao campus da Alameda que terminou no anfiteatro do Complexo Interdisciplinar onde decorreu uma sessão de divulgação de ciência.

Os professores Mário Nuno Berberan e Santos e Manuel Prieto lançaram "Luz sobre as Moléculas" num ambiente eletrizante, não obstante a pouca luminosidade da sala necessária à visualização das muitas demonstrações realizadas.

A sala ainda ecoava com as reacções da assistência quando entraram em acção os Detectives Químicos, Leonel Silva (imediatamente reconhecido pela sua participação no programa da RTP ABCiência) e a professora Palmira F.

Silva que, com a ajuda preciosa da bióloga Raquel Dias (que participou igualmente no ABCiência), falaram de Química e Biologia de forma lúdica através de três peças, que ilustraram simultaneamente a transversalidade da Química (ver “Os detectives da Química”). Os participantes descobriram como os químicos deslindaram os mistérios da planta do arcanjo Gabriel ou do ácido que determinou a insanidade dos pássaros que inspiraram o realizador Hitchcock para o filme de culto «Os pássaros».

No final das apresentações, os professores Mário Nuno Berberan e Santos e Jorge Morgado, em representação da SPQ e do Conselho Directivo do IST, respectivamente, deslindaram o mistério que àquela hora enchia a cabeça dos participantes: quem teria vencido as provas?

Antes ainda da divulgação dos resultados, os participantes foram informados que todos tinham tido uma prestação que lhes merecera um passaporte para a Química e foi-lhes dado o documento que confirmava as respectivas competências nesta ciência.

O momento alto do dia aconteceu com o anúncio das equipas vencedoras desta edição IST das OQJ de 2008: **Medalha de Ouro:** Rafael Inácio, Adriana Flora e Sara Tainha; Colégio Infante Santo (Santarém); **Medalha de Prata:** Rita OLiveira, Catarina Victorino e Patrícia Mendes; Escola BI do Couço - ou Escola EBI/JI de Couço (Coruche); **Medalha de Bronze:** João Marques, Sara Brites e Mariana Fidalgo; EB 2,3 Gaspar Correia (Sacavém).

O dia, que deixou em todos os participantes a vontade de voltar a participar nesta ou noutra iniciativa da SPQ, encerrou-se nas instalações do Técnico com uma confraternização e lanche no bar de Civil.

Para o ano, o Departamento de Engenharia Química e Biológica do IST terá todo o prazer em ser anfitrião de uma prova que decorreu de forma tão animada e frutuosa!

Palmira Silva



## INSTITUTO DE TECNOLOGIA QUÍMICA E BIOLÓGICA

Mais uma vez se levou a bom porto uma edição das Olimpíadas de Química Júnior no Instituto de Tecnologia Química e Biológica (ITQB). Desta vez foram mobilizados 67 alunos concorrentes, 10 professores acompanhantes e 8 membros das equipas organizadoras do ITQB. De uma forma geral os participantes, provenientes do Colégio D. Luísa Sigea (Estoril), Esc. 2,3 com Esc. Sec. Aquilino Ribeiro (Oeiras), Esc. 2,3 Dr. Afonso Rodrigues Pereira (Lourinhã), Colégio Miramar (Maфра), Esc. Técnico-Lic. Sto António (Selesianos do Estoril), Esc. EBI de São Bruno (Caxias) e da Esc. 2,3 Miguel Torga (Amadora) começaram a chegar ao campus da instituição a partir das 9 horas.

Pelas 10 horas teve lugar a cerimónia de Abertura Oficial das Olimpíadas Júnior, realizada no auditório, presidida pelo Coordenador local das Olimpíadas de Química Júnior, Prof. António Lopes, e pela Dr<sup>a</sup> Ana Sanchez em representação da direcção do ITQB.

Depois das boas vindas, foi anunciado o programa das provas e foram enunciadas as regras a todos os presentes:

- 30 perguntas, em cada uma delas apenas uma opção certa;
- classificação de 1 ponto para resposta certa, 0 pontos para nenhuma resposta;
- o tempo total de realização seria critério de desempate;
- os professores acompanhantes dos alunos não podiam contactar os alunos até ao término das provas.

Seguiu-se um período de 2 horas e 30 minutos destinado à realização das Provas das Olimpíadas. Os participantes foram chamados a responder ao conjunto de 30 questões, algumas de carácter teórico, respondidas numa sala de aula, e outras de carácter mais experimental (observações experimentais, medições, etc.) montadas no laboratório de ensino do ITQB.

Cada uma das equipas tinha um “delegado” da instituição de acolhimento (recrutado entre alunos de doutoramento, docentes, e pessoal não docente) responsável por acompanhar a equipa na sua deslocação entre o auditório, a sala e o laboratório, cronometrando o respectivo tempo de realização.

Enquanto decorriam as provas para alguns dos participantes, os restantes assistiram (depois revezaram-se) à projecção de resumos do “Dia Aberto” do ITQB e de resumos de várias intervenções de investigadores em programas de televisão.

E ... chegámos ao período de almoço (bem merecido!). Gentilmente oferecido pela Câmara Municipal de Oeiras, que assim se quis associar ao evento.

Enquanto eram corrigidas as provas por um júri de docentes das instituições de acolhimento, a maioria dos participantes (alunos e professores) preferiram o bom tempo aliado ao local privilegiado onde se insere o ITQB -a Quinta da Estação Agronómica Nacional- para irem fazer um passeio nos campos de papoilas, ver os cavalos, ou mesmo os lagos com belos azulejos do tempo do Marquês de Pombal (e também do Conde de Oeiras) até à

hora pré-determinada para a sessão de encerramento.

Chegada a hora, e com grande emoção no auditório, teve lugar a Sessão de Encerramento das Olimpíadas, presidida pelos mesmos representantes da Sessão de Abertura. A todos os participantes foram distribuídos diplomas de participação. Seguidamente foram exibidas as estatísticas anónimas dos resultados finais (distribuição dos resultados), e anunciadas as equipas por ordem de posicionamento (3º, 2º e 1º). Cada uma destas equipas recebeu ainda um diploma da SPQ atestando a obtenção desse prémio e a respectiva medalha de “Bronze”, “Prata” e “Ouro”.

Assim, as escolas/alunos premiados foram: **3º lugar – Bronze:** Equipa da Escola Salesiana do Estoril, constituída pelos alunos Rafael Gameiro, Pedro Moreira e Nadir Silva; **2º lugar – Prata:** Equipa da Escola Salesiana do Estoril, constituída pelos alunos José Lopes, Inês Lopes e Ruben Leitão; **1º lugar – Ouro:** Equipa do Colégio Miramar, constituída pelos alunos Jorge Atabão, Pedro Jorge e António Batalha.

Todos manifestaram ter gostado, ter participado na festa e quererem voltar! Tanto é assim que já ficaram algumas equipas “inscritas” para a próxima edição das provas.



O Coordenador das Olimpíadas de Química Júnior no ITQB

António Lopes

## UNIVERSIDADE DO ALGARVE



Mais uma vez, no passado dia 19 de Abril, decorreu a semi-final das Olimpíadas da Química Júnior nas instalações do Departamento de Química, Bioquímica e Farmácia da Universidade do Algarve. Embora o número de inscrições fosse muito elevado apenas foi possível a participação de 28 equipas, duas no máximo de cada escola, que corresponde a um total de 84 alunos, provenientes de 16 Escolas Básicas da região do Algarve e Baixo Alentejo.

Os alunos e respectivos professores começaram a chegar bem cedo e de acordo com o programa estabelecido foi-lhes entregue um saco alusivo ao evento e que continha pequenas lembranças.

Às 10 horas iniciou-se a realização das provas das Olimpíadas, metade dos participantes foram chamados a responder ao conjunto de 30 perguntas, subdivididas em duas secções:

na secção I apenas uma opção era certa, já na secção II havia possibilidade de haver mais que uma opção; enquanto isso acontecia, a outra metade dos participantes realizava a prova de carácter experimental (observações, medições, etc.) montada em 4 laboratórios de Química.

Passados 1 hora e 15 minutos os alunos fizeram uma pausa para pequeno-almoço, oferta da Conselho Directivo da Faculdade de Ciências e Tecnologia, após o qual se procedeu à troca, ou seja, quem havia realizado a prova teórica foi fazer a prova experimental e vice-versa.

Depois do almoço, na cantina da Universidade, seguiu-se a sessão de divulgação dos resultados, com a entrega dos prémios e diplomas aos 3º, 2º e 1º lugares, feita pela Presidente do Departamento de Química, Bioquímica e Farmácia e pela Coordenadora destas Olimpíadas. Como vencedores tivemos:

• **Medalha de Ouro:** Mariana Luz, Tiago Rosa e Artur Neves; da E,B 2,3 D. Afonso III, de Faro, (Professora acompanhante: Cláudia Neves);

• **Medalha de Prata:** Bárbara Martins Sousa, Rita Rosa Domingos e Sérgio Miguel Romualdo, da escola E, B 2,3 João da Rosa, Olhão, (Professora acompanhante Paula Moura);

• **Medalha de Bronze:** Filipe Miguel P. Marreiros, João Pedro Pinto e Catarina Vieira L. Alves, da escola E,B 2,3 Padre João Coelho Cabanita, Loulé (Professora acompanhante Ana Paula Salgado).

Todos manifestaram terem gostado de participar na festa e quererem voltar para o ano se possível!

A coordenadora da Semi-final das Olimpíadas de Química Júnior do Algarve e Baixo Alentejo

Custódia Fonseca

## FINAL NACIONAL DAS OLIMPIADAS DE QUÍMICA JÚNIOR 2008

A organização por diversas Universidades Portuguesas da competição anual das Olimpíadas de Química Júnior, a nível regional, faz parte do projecto educacional da SPQ, visando incentivar o interesse e a valorização da Química junto dos jovens. Com o objectivo de envolver este público tão cedo quanto possível, esta competição iniciou-se, em 2005, para os alunos do 3º Ciclo do Ensino Básico, tendo vindo a revelar-se algo de muito motivador pela receptividade das Escolas e consequente interesse e adesão dos alunos e seus professores.

Em 2008, ano da 4ª edição das Olimpíadas de Química Júnior, a nível regional, a SPQ lançou um novo desafio: a realização da Primeira Final Nacional das Olimpíadas de Química Júnior. O Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, movido pelo entusiasmo e gosto que estas acções despertam, disponibilizou-se para organizar o evento e, tendo-lhe sido atribuída tal tarefa, foi com um enorme prazer que, no dia 10 de Maio de 2008, acolheu 19 equipas concorrentes, seleccionadas pela SPQ entre as mais bem classificadas nas diversas regiões do continente, de Bragança ao Algarve, e dos Açores!

Ao propormo-nos organizar esta Final Nacional, para além do bem-estar que pretendíamos proporcionar aos nossos visitantes, estávamos conscientes da responsabilidade que sobre nós recaía: a preparação de uma prova completamente nova e que garantisse a igualdade de condições a todos os candidatos. A prova constou de um trajecto através de quatro laboratórios para observação e interpretação de experiências e factos do quotidiano e, ainda, da passagem por um Anfiteatro para responder a uma série de questões sobre aplicações químicas que eram projectadas em períodos previamente programados. Embora tenha sido nossa intenção impedir que qualquer candidato se sentisse frustrado pela participação numa prova com um grau de dificuldade demasiado elevado, não se poderá dizer que a prova apresentada fosse simples! E, assim, é gratificante verificar que a participa-

ção dos estudantes foi muito positiva, com um desempenho que se traduziu em resultados no intervalo [64,2 % - 88,3 %], indicador da qualidade dos *jovens olímpicos*...

Após a prova, seguiu-se o almoço nas instalações da cantina da Faculdade de Letras da UP. Este intervalo de almoço permitiu ultrapassar o nervosismo da manhã, mas a quem tal não sucedeu, a sessão da tarde encarregou-se de o fazer. De facto, durante a tarde foi possível assistir a uma exibição de Experiências de Salão, apresentadas pelo Professor Carlos Corrêa, cujo saber e experiência proporcionaram momentos "químicos" bem divertidos... Seguiu-se a sessão de encerramento com a divulgação e entrega de medalhas às três equipas mais bem classificadas, a atribuição de prémios para estas e também para todas as classificadas em quarto lugar (destinados a alunos, professores acompanhantes e bibliotecas das respectivas escolas), e a entrega de diplomas para todos os alunos e professores acompanhantes.

O fim da festa decorreu com um lanche nas instalações do bar da Faculdade de Ciências e participado por todos os envolvidos na Final Nacional das Olimpíadas de Química Júnior 2008. Para finalizar este registo, impõe-se referir o seguinte:

- A oferta de prémios a todos os *olímpicos* resultou do generoso patrocínio de várias empresas: Porto Editora, Texto Editores, Texas Instruments, Lidel e MTBrandão. A Reitoria da Universidade do Porto

também apoiou esta iniciativa, concedendo um subsídio para algumas despesas.

- A preparação deste evento só foi possível com a colaboração de um grupo de docentes do Departamento de Química, que não pouparam os esforços para o sucesso da iniciativa, e de alunos dos 1º e 2º Ciclos de Estudos em Química que, com entusiasmo, garantiram a orientação, o convívio e a integração dos jovens concorrentes.

Resta-me agradecer a todos os docentes, alunos e outros membros do Departamento de Química da FCUP, que contribuíram para imprimir ao dia 10 de Maio de 2008 uma química especial, proporcionando a um grupo especial de jovens portugueses uma recordação que, se espera, lhes será grata por muito tempo.

Aos alunos concorrentes, aos seus professores e respectivas Escolas, agradecemos o empenhamento e o entusiasmo. PARABÉNS!

### Medalha de Ouro:

Bernardo P. Figueiredo, Catarina M. Correia, João M. P. Pereira

**Escola EB 2,3 Frei Estevão Martins** (Alcobaça)

### Medalha de Prata:

Mafalda Araújo, José P. Rodrigues, José M. Ribeiro

**Externato Delfim Ferreira** (Riba d'Ave)

### Medalha de Bronze:

Bárbara Costa, Tiago Lia, Ana Sousa

**Colégio Boavista** (Vila Real)

Maria das Dores M. C. Ribeiro  
da Silva





**Dias de Sousa**  
INSTRUMENTAÇÃO ANALÍTICA E CIENTÍFICA, S.A.



**Quem dizia que depressa e bem não há quem?**

**Que tal ser o primeiro a conseguir:**

**>40.000 FWHM Resolução; <1 ppm Exactidão de Massas e 20 Espectros/segundo?**

Apresentamos o novo e revolucionário LC/MS Ultra-Rápido:

**maXis® UHR-TOF/RSLC UltiMate®-3000 LC/MS**

O LC/MS da Bruker Daltonics **maXis** “Ultra High Resolution (UHR) – TOF”, em combinação com o **RSLC** (“Rapid Separation LC”) **UltiMate® 3000** da Dionex, é o único sistema de espectrometria de massa em fase líquida com capacidade para obter o máximo de informação, aos mais elevados níveis de rapidez.

Não existe outro Sistema LC/MS melhor equipado para adquirir dados definitivos de identificação de pequenas moléculas químicas.

**Máxima Informação com a Máxima Rapidez**

Pergunte-nos como em:

**Tel. 21 953 31 20**

**Fax: 21 953 31 29**

**Paula Lourenço**

**[plourenco@dias-de-sousa.pt](mailto:plourenco@dias-de-sousa.pt)**

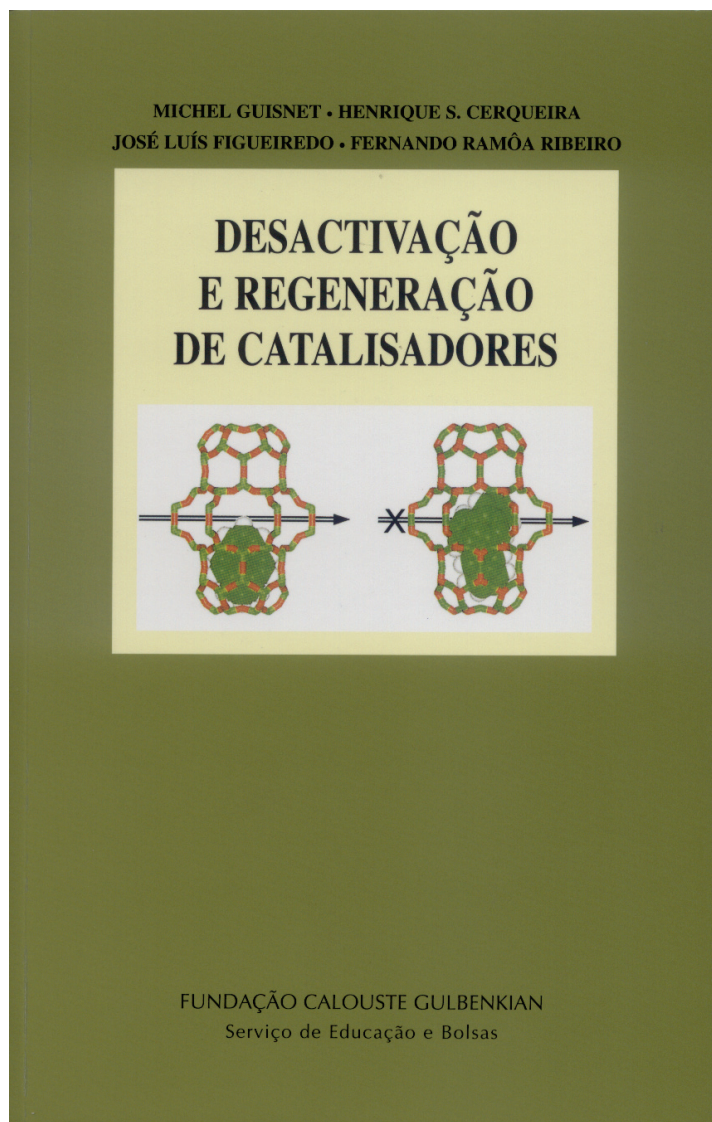
**[www.dias-de-sousa.pt](http://www.dias-de-sousa.pt)**



**Experimente esta combinação de Sucesso  
e reinvente os ditados de outrora...**

## DESACTIVAÇÃO E REGENERAÇÃO DE CATALISADORES

POR Michel Guisnet, Henrique S. Cerqueira, José Luís Figueiredo e Fernando Ramôa Ribeiro



Fundação Calouste Gulbenkian – Serviço de Educação e Bolsas Lisboa, 2008

ISBN: 978-972-31-1241-2

### EXCERTOS DO PREFÁCIO, DA AUTORIA DO DOUTOR EDUARDO FALABELLA SOUSA-AGUIAR

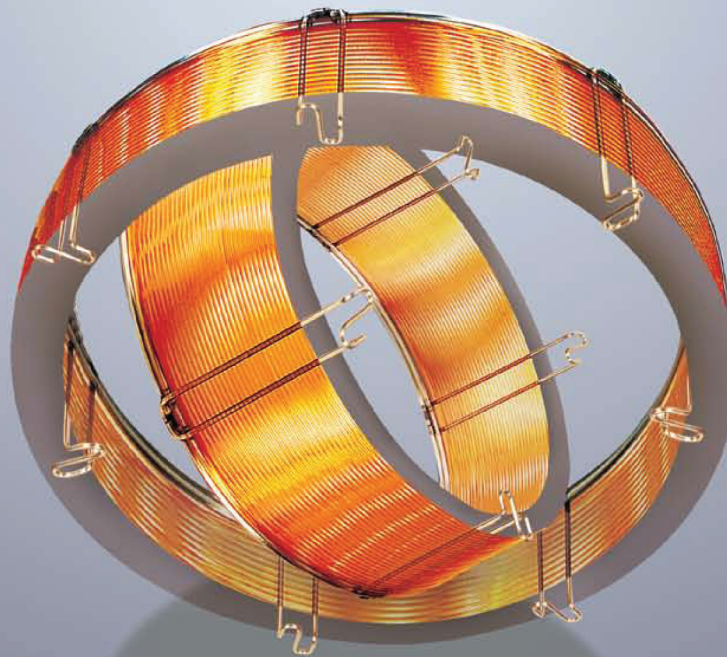
*Embora a desactivação de catalisadores seja um fenómeno cuja importância cresce a partir da observação de ocorrências industriais, este livro não se resume a discutir o “apenas observado”. Os seus vários capítulos procuram, de maneira excepcionalmente didáctica, revelar a essência do fenómeno da desactivação de catalisado-*

*res tanto heterogéneos, o que é mais usual, quanto homogéneos, numa tentativa inovadora de abranger todos os campos da Catálise.*

.....

*Caro leitor, esteja seguro de que se depara com um livro didáctico de excelente qualidade, capaz de não só conduzir de forma clara e objectiva os neófitos no campo da desactivação, revelando um universo desconhecido*

*e fascinante, como também de ajudar aqueles que já trabalham na área, seja nas indústrias, seja em laboratórios de investigação. É uma publicação pioneira em língua portuguesa, pelo que, indubitavelmente, em muito colaborará com os professores universitários que ministram cursos de Catálise, Cinética, Reactores e Processos Catalíticos.*



## Innovation Comes In Many Forms

Zebtron - Revolutionizing the Field of Gas Chromatography



- Zebtron™ ZB-WAX PLUS :** Ideal for polar compounds . 100% aqueous stable.
- Zebtron MultiResidue™ :** Perfect for pesticide analysis . For US EPA 8081A, baseline resolution is achieved in just 10 minutes!
- Zebtron ZB-1HT Inferno™ and ZB-5HT Inferno™ :** The world's highest temperature non-metal GC columns. Provides true boiling point separation for hydrocarbon distillation methods.

Zebtron has been revolutionizing the field of gas chromatography with its commitment to producing innovative, high quality columns that meet the needs of today's gas chromatographers. Our scientists have developed key technologies, such as Engineered Self Cross-linking™ (ESC) and Arylene Matrix Technology™ (AMT), to create GC columns that provide high temperature stability, improved lifetime, low bleed, and low activity. Each and every column is individually QC tested to ensure that they have excellent batch-to-batch reproducibility so you will have reliable and reproducible results, every time. **For a column that best meet your needs, please contact your local Phenomenex Technical Specialist.**

Zebtron, ZB-1HT Inferno, ZB-5HT Inferno, Engineered Self Cross-linking, Arylene Matrix Technology, and MultiResidue are trademarks of Phenomenex, Inc. © 2007 Phenomenex, Inc. All rights reserved.

 [www.phenomenex.com](http://www.phenomenex.com)  
Phenomenex products are available worldwide. For the distributor in your country, contact Phenomenex USA, International Department by telephone, fax or e-mail: [international@phenomenex.com](mailto:international@phenomenex.com).

 **phenomenex**  
...breaking with tradition™

5171.L

<b>Australia</b> tel: 02-9428-6444 info@phenomenex.com.au	<b>Austria</b> 01-319-1301 anfrage@phenomenex.com	<b>Canada</b> (800) 543-3681 info@phenomenex.com	<b>Denmark</b> 4824 8048 dkinfo@phenomenex.com	<b>France</b> 01 30 09 21 10 franceinfo@phenomenex.com	<b>Germany</b> 06021-58830-0 anfrage@phenomenex.com	<b>Italy</b> 051 736176 italiainfo@phenomenex.com	<b>Ireland</b> 01 247 5405 eireinfo@phenomenex.com	<b>New Zealand</b> 09-4780951 info@phenomenex.co.nz	<b>Puerto Rico</b> (800) 541-HPLC info@phenomenex.com	<b>United Kingdom</b> 01625-501367 ukinfo@phenomenex.com	<b>USA</b> (310) 212-0555 info@phenomenex.com
---	---	--	--	--	---	---	--	---	---	--	---



## 3º ENCONTRO DO INSTITUTO D. JOÃO V VIDA SAUDÁVEL E GASTRONOMIA

**Vida Saudável e a Gastronomia** foi a temática do “3.º Encontro do Instituto D. João V”, cujos protagonistas foram os 1600 alunos da nossa escola, repartidos pelo Ensino Básico e Secundário, e os alunos dos agrupamentos das escolas do 1.º Ciclo da nossa área pedagógica.

Definir o conceito de “Vida Saudável” não é fácil uma vez que “saudável” é tudo o que traz benefícios à saúde. Todos concordamos, no entanto, que é necessário combinar vários factores, como a alimentação variada, a actividade física, a actividade psicológica equilibrada e a prevenção de doenças.

A Gastronomia, arte de comer bem, ou seja, de apreciar a boa preparação das iguarias, surge como uma forma de promover a vida saudável em algumas das vertentes referidas anteriormente. Valoriza a socialização, o prazer em estar à mesa e descobrir a culinária em toda a sua diversidade. Ajuda-nos a viajar ao longo da História, no mundo e no nosso país. Desperta a curiosidade científica, numa tentativa de compreender algumas práticas culinárias e alguns “segredos” bem guardados ao longo dos tempos. Num mundo que se encontra cada vez mais globalizado é importante dar a conhecer alguns produtos muito especiais, produtos “gourmet”, algumas receitas típicas do nosso país e do mundo.

Do programa constou a realização de um ciclo de cinema, uma Feira do Livro, diversos concursos, peças de teatro, passagem de modelos, exposições diversificadas, actividades desportivas e culturais e, por fim, apresentações/workshops no âmbito da investigação e da divulgação científica.

*A Química e a Física na Gastronomia*, foi o título da exposição interactiva preparada e apresentada por alunos do 11.º ano, no Laboratório de Química. Nela, os alunos tiveram a oportu-

nidade de relacionar, com a Química e a Física, algumas das actividades que se fazem no dia-a-dia nas cozinhas das nossas casas.

Os Fondues (de queijo e chocolate),



Os bolos e os fermentos químicos

a oxidação dos alimentos e os antioxidantes, os produtos Gourmet (flor de Sal),



Os grelhados e as reacções de Maillard

os molhos (vinagrete e maionese), os biscoitos do Lourival, as chouriças assadas em álcool,



Reacções exotérmicas e chouriças assadas

as fontes de aquecimento e os mecanismos de transferência de calor,



Café de balão e pressão de vapor

o chumbo nas cerâmicas vidradas, as reacções da digestão, as pipocas,



Pipocas e pressão

a erosão dos dentes e as pastas dentárias, o gás dos refrigerantes, a temperatura a que ferve a água (baixa e alta pressão) e as panelas de pressão, o café de balão, as batatas fritas e cozidas,



Batatas fritas ou cozidas

o estado de divisão e a velocidade das reacções, o amido de milho (fluido não newtoniano), os bolos, as gelatinas e as mousses...foram algumas das actividades desenvolvidas pelos alunos ao longo destes dias *saborosos*.

Ana Vaz Pinto  
Pedro Vaz Pinto

## CURIOSIDADES - PILHAS DE LÍTIO



Andreas Gutsch, director executivo da Li-Tec Battery apresenta a última geração de pilhas de lítio, o Separion (Imagem: Li-Tec Battery)

O lítio permite o desenvolvimento de pilhas que combinam a melhor razão energia/peso com a maior força electromotriz (ou voltagem).

As pilhas e baterias de lítio iónico ou de ião lítio, desenvolvidas em meados dos anos 80 por John B. Goodenough para a Sony, são comercializadas desde 1991 mas a sua baixa estabilidade térmica limita o seu campo de aplicação.

Em finais de 2007, dois anúncios prometiam revolucionar o mercado da energia limpa portátil com novas baterias de lítio. A ExxonMobil Chemical e a sua afiliada japonesa Tonen Chemical apresentaram um polímero revolucionário que permite melhorar a potência, segurança e estabilidade das baterias de ião lítio usadas em veículos eléctricos e híbridos. O anúncio foi feito no *23rd Electric Vehicle Symposium and Exposition (EVS-23)* que decorreu entre 2 e 5 de Dezembro perto da Disneylândia, em Anaheim na Califórnia.

Em Dezembro de 2007 foi criado na Alemanha um consórcio, *Lithium-Ion Battery LIB 2015*, que pretende explorar as baterias de ião lítio da firma Li-Tec, que «são 30% menos volumosas que as da Toyota e permitem uma au-

tonomia três vezes maior com o mesmo peso dos modelos franceses».

Em vez de um filme polimérico, a Li-Tec, uma pequena empresa que integrou o consórcio que inclui a Volkswagen, a BASF e a Bosch, inventou uma membrana cerâmica muito flexível que separa como um papel os dois elementos de pilha e permite uma maior estabilidade térmica.

Na altura, o porta-voz da Bosch afirmou que a medida «É um passo para tornar os automóveis completamente eléctricos».

Em finais de Maio, a empresa alemã Evonik anunciou um investimento massivo em baterias de ião lítio, pretendendo ser o maior fornecedor europeu na área.

A companhia está a expandir as suas unidades de produção e duplicou a participação na Li-Tec da qual passa a deter uma quota de 40%.

Com a crise do petróleo, cada mais indústrias automóveis investem no desenvolvimento de baterias de lítio, presentemente muito utilizadas em dispositivos móveis como telemóveis e computadores portáteis. A Continental anunciou em Janeiro que irá

comercializar ainda em 2008 baterias de lítio para automóveis tornando-se o primeiro fornecedor de componentes para a indústria automóvel a iniciar uma produção em massa destas fontes de energia. Embora a Continental não tenha revelado que marca ou marcas irá fornecer, é expectável que na lista de clientes esteja incluída a General Motors (GM).

Um consórcio da Continental com a A123 Systems tem um contrato com a GM para o desenvolvimento de baterias de ião lítio destinadas ao sistema E-FLEX do programa Chevy Volt da GM.

Outros consórcios da indústria automóvel iniciaram programas de desenvolvimento de baterias de lítio destinadas a carros híbridos ou totalmente eléctricos como sejam a Toyota e a Matsushita Electric Industrial Co., a Mitsubishi Motors Corp. e a GS Yuasa International Ltd., ou a Nissan e a NEC.

[http://corporate.evonik.com/en/press/press-releases/2008/080529\\_pm\\_kamenz.html](http://corporate.evonik.com/en/press/press-releases/2008/080529_pm_kamenz.html)

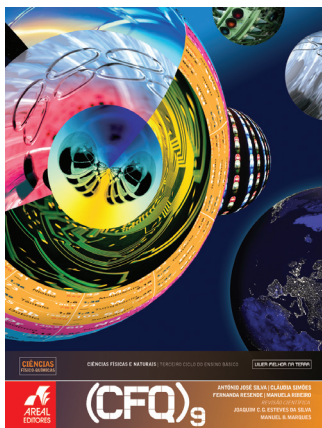
PS

## MANUAIS DE QUÍMICA para o 3.º ciclo e ensino secundário

Reunimos algumas propostas editoriais para o próximo ano lectivo.

Propomo-nos apenas divulgá-las, sem que tal implique, por parte da SPQ ou da Comissão Editorial do QUÍMICA, qualquer juízo de valor sobre as mesmas.

### MANUAIS PUBLICADOS PELA AREAL EDITORES:



Manual: (CFQ)<sub>9</sub>  
Autores: António José Silva;  
Cláudia Simões; Fernanda Resende;  
Manuela Ribeiro  
ISBN: 978-972-627-993-8



Manual: Química 11  
Autores: Aquiles Araújo Barros; Carla Rodrigues;  
Lúcia Miguelote; Maria Isabel Rocha  
ISBN: 978-972-627-968-6

### MANUAIS PUBLICADOS PELA PORTO EDITORA:



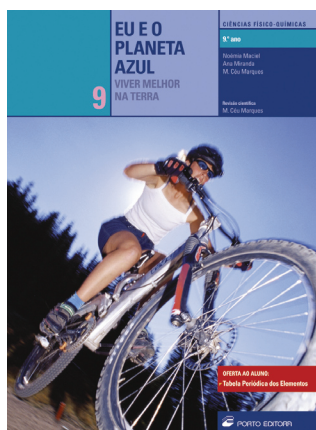
Manual: Química em Contexto - Física e Química A - 11.º Ano  
Autores: Teresa Sobrinho Simões; Maria Alexandra Queirós; Maria Otilde Simões  
ISBN: 978-972-0-42322-1



Manual: Química no Mundo Real - Física e Química A - 11.º Ano  
Autores: Carlos Corrêa; Fernando Pires Basto; Noémia Almeida; Delfim Pereira  
ISBN: 978-972-0-42249-1



Manual: Física e Química na Nossa Vida - 9.º Ano  
Autores: M. Margarida R. D. Rodrigues; Fernando Morão Rodrigues  
ISBN: 978-972-0-32812-0



Manual: Eu e o Planeta Azul - Ciências Físico-Químicas - 9.º Ano  
Autores: Noémia Maciel; Ana Miranda; M. Céu Marques  
ISBN: 978-972-0-32843-4

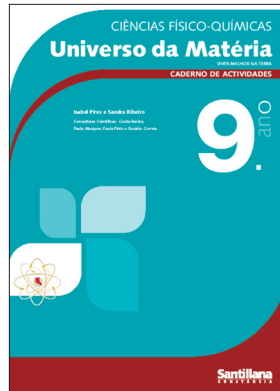
MANUAIS PUBLICADOS PELA SANTILLANA:

MANUAL: CIÊNCIAS FÍSICO-QUÍMICAS 9

Autores: Isabel Pires e Sandra Ribeiro



Manual



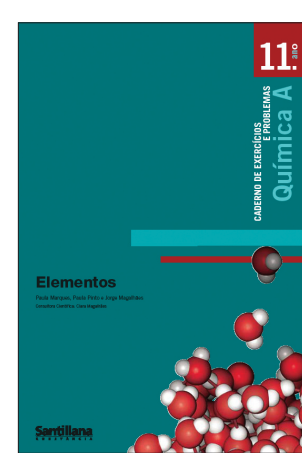
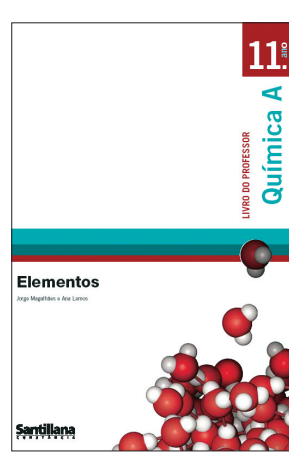
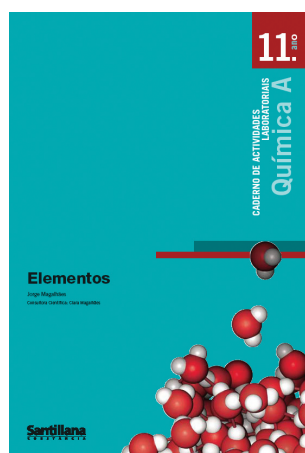
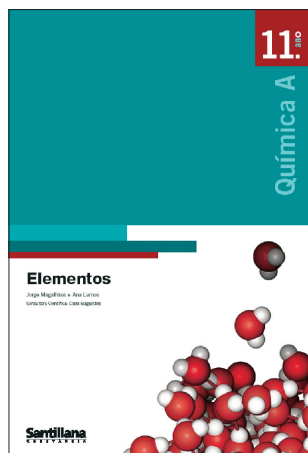
Caderno de Actividades



Livro do Professor

MANUAL: QUÍMICA 11

Autores: Jorge Magalhães e Ana Lemos

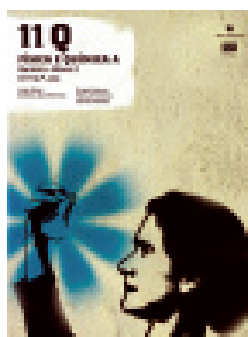


Manual + Caderno de Actividades Laboratoriais + Livro do Professor + Caderno de Exercícios e Problemas

MANUAIS PUBLICADOS PELA TEXTO EDITORES:



Manual: 9CFQ - Ciências Físico-Químicas 9.º ano  
Autores: Carlos Fiolhais; Manuel Fiolhais; Victor Gil; João Paiva; Carla Morais; Sandra Costa  
ISBN: 978-972-47-3613-6



Manual: 11F - Física 11.º ano  
Autores: Carlos Fiolhais; Manuel Fiolhais; Graça Ventura; João Paiva; António José Ferreira  
ISBN: 978-972-47-3670-9

Manual: Jogo de Partículas – Química 11.º ano  
Autores: Maria da Conceição Dantas; Marta Duarte Ramalho  
ISBN: 978-972-47-3661-7

Manual: 11Q - Química 11.º ano  
Autores: João Paiva; António José Ferreira; Carlos Fiolhais; Manuel Fiolhais; Graça Ventura  
ISBN: 978-972-47-3667-9

## Os DETECTIVES QUÍMICOS\* nas Olimpíadas de Química 2008-IST

LEONEL SILVA, RAQUEL DIAS E PALMIRA F. SILVA\*

### UMA PISTA BRILHANTE

Esta sala está sob investigação criminal. Foi denunciado o desaparecimento de uma pessoa e há suspeitas de que possa ter sido agredida neste local.

À primeira vista, não há nenhum indício de que alguém possa ter sido agredido aqui. É claro que o agressor teria tido o cuidado de limpar todos os vestígios de sangue, bastando para isso utilizar um detergente convencional. E, aparentemente, fez um bom trabalho porque não deixou nem uma pequena gota visível para contar a história.

Será que este criminoso conseguiu mesmo eliminar todas as pistas e vai escapar impune?

Na realidade, por mais esforçado que ele tenha sido a limpar o sangue da vítima ou o seu próprio, ficam sempre pequenos vestígios que, não sendo visíveis a olho nú, podem ser revelados utilizando compostos químicos apropriados.

O mais famoso destes compostos é, provavelmente, o luminol ou 5-amino-2,3-di-hidro-1,4-ftalazinadiona.

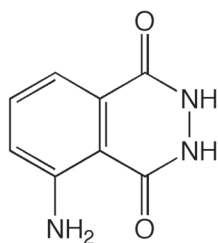


Figura 1 Estrutura do luminol

O luminol foi descoberto em 1928 na Alemanha por um químico chamado Albrecht e começou a ser utilizado na investigação criminal em 1937.

Os investigadores preparam uma solução de luminol com um agente oxi-

dante e borrifam na presumível zona do crime. Esta solução permite revelar vestígios de sangue passados até seis anos com uma sensibilidade de 1:1 mil milhões. Isto significa que o luminol é capaz de revelar uma partícula de sangue dispersa entre 999 milhões de outras partículas, como a água. Tem ainda a vantagem de não afectar a cadeia de DNA, permitindo o reconhecimento posterior dos criminosos ou das vítimas. Vamos então preparar a solução de luminol. Para tal necessitamos de:

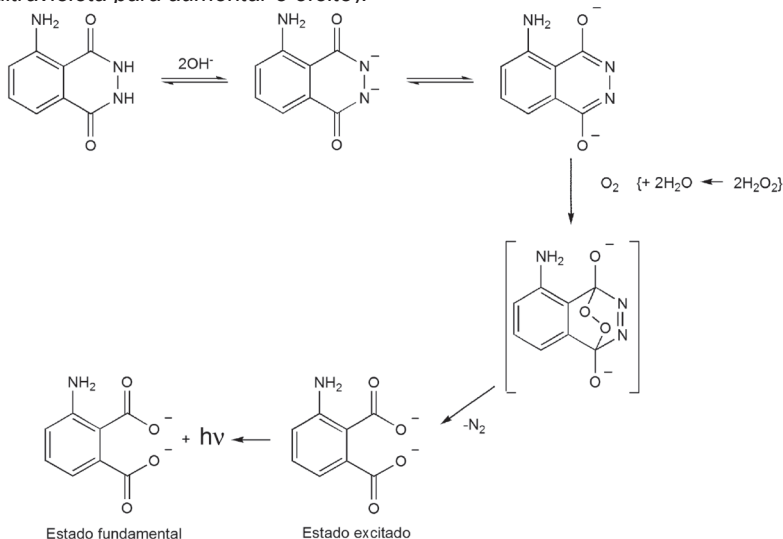
- 250 ml de água;
- 2 g de luminol (*testar primeiro com 0,2 g. Pode ser suficiente*);
- 15 g de KOH

(KOH pode ser substituído por outra base, como NaOH ou Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, e a solução deve ter pH ~11).

Num dispersor, misturamos igual volume da solução anterior e peróxido de hidrogénio (água oxigenada) 3%, o tal agente oxidante.

Está pronto a usar!

Borrifamos com um pouco da mistura o local do crime e reduzimos a luminosidade da sala. As manchas de sangue brilham com uma luz azulada durante cerca de 30 s e, numa investigação real, a imagem seria registada fotograficamente. (*Pode-se usar uma luz ultravioleta para aumentar o efeito*).



Literalmente, podemos dizer que se fez luz nesta nossa investigação. O criminoso desconhecia a reacção quimioluminescente do luminol com peróxido de oxigénio.

### O FUNDAMENTO CIENTÍFICO

Quimioluminescência refere-se à emissão de luz resultante de uma reacção química. Os produtos da reacção são substâncias num estado electrónico excitado, que, ao passarem para o estado fundamental, emitem fótons. No fundo, é o inverso de uma reacção fotoquímica.

Em solução básica, o luminol, que existe sob a forma aniónica, reage com o oxigénio resultante da decomposição do peróxido de hidrogénio, originando um peróxido orgânico muito instável. Este decompõe-se imediatamente em azoto e ácido 3-aminoftálico num estado excitado. Ao regressar ao estado fundamental, o ácido liberta um fóton, cujo comprimento de onda corresponde à luz azul.

A oxidação do luminol descrita anteriormente é catalisada por diversos iões metálicos, como cobre(II) e ferro(III). Fora do organismo, o centro metálico dos grupos heme presentes na hemoglobina do sangue oxida-se

\* Também disponível em:  
<http://web.ist.utl.pt/palmira/ars.scientia>

de ferro(II) a ferro(III) e este último catalisa a oxidação do luminol pelo peróxido de hidrogénio e também o mecanismo de decomposição do próprio peróxido. Como se trata de um catalisador, basta uma pequena quantidade de sangue para que a oxidação do luminol ocorra com libertação evidente de luz.

Apesar de muito útil na investigação criminal, o luminol apresenta, no entanto, algumas desvantagens. A principal é que há outras substâncias com as quais pode reagir, com libertação de luz. Se o criminoso em questão percebesse um pouco de química ou estivesse mais atento aos programas de ficção da TV, teria utilizado lixívia em vez de detergente para limpar o local. A lixívia é uma solução fortemente oxidante de hipoclorito de sódio (NaOCl) provocando o mesmo efeito sobre o luminol que a água oxigenada, mas sem necessidade da presença de um catalisador como a hemoglobina.

Vamos então supor que o nosso criminoso afinal sabia alguma coisa de química e utilizou lixívia em vez de detergente para limpar esta área. *(Limpeza com lixívia e aplicação do luminol. Nota: é necessário testar se a solução ainda está activa. Talvez fosse bom guardá-la no frio).*

Neste caso, as gotas de sangue ficam dissimuladas pela lixívia, impossibilitando a identificação. No entanto, já começam a surgir novas misturas à base de luminol que conseguem eliminar a interferência do hipoclorito de sódio nos testes forenses de sangue com luminol.

### **O ÁCIDO QUE ENLOUQUECEU OS PÁSSAROS DE HITCHCOCK**

Numa madrugada de Agosto, corria o ano de 1961, a pacata localidade costeira de Capitola na Califórnia foi surpreendida por uma cena que parecia saída do livro «Os pássaros» de Daphne du Maurier, publicado nove anos antes. Centenas de aves marinhas invadiram o local e atacaram os habitantes num episódio bizarro que fascinou Alfred Hitchcock, veraneante frequente na vizinha Santa Cruz. Hitchcock recolheu as notícias que fizeram as manchetes dos jornais

loais e propôs ao seu estúdio a realização de um filme que apareceria nos cinemas dois anos depois. (Como nota de curiosidade, refira-se que está prevista para 3 de Julho de 2009 a estreia de um “remake” do filme).

*Na altura, o nevoeiro cerrado que teria confundido os pássaros e os induzira a procurar as luzes da cidade foi a única explicação encontrada para o incidente, que não explicava o comportamento insano das pardelas negras, pássaros habitualmente pacíficos.*



### **A CAUSA**

Uma explicação para o que de facto acontecera naquela manhã de 18 de Agosto de 1961 só foi possível em 1987 depois de “detectives” químicos (e biólogos) terem entrado em acção para descobrir o que causara a intoxicação de mais de uma centena de pessoas de *Prince Edward Island* no Canadá.

Esta era uma intoxicação alimentar pouco comum: aos sintomas iniciais somavam-se dores de cabeça incapacitantes a que se seguiam confusão, perda de memória, desorientação e, em casos extremos, tremores e coma.

Algumas das pessoas afectadas exibiam volatilidade emocional com manifestações de agressividade ou choro descontrolado. Três das vítimas faleceram e outras sofreram danos neurológicos irreversíveis.

Uma vez que a perda de memória era o traço comum a muitas vítimas, a condição foi designada por intoxica-

ção amnésica (*amnesic shellfish poisoning, ASP*).

Epidemiologistas da *Health Canada* rapidamente identificaram o culpado macroscópico pela doença: mexilhões recolhidos de uma área específica da ilha nunca antes atingida por problemas análogos nem onde antes se detectaram florescências de algas.

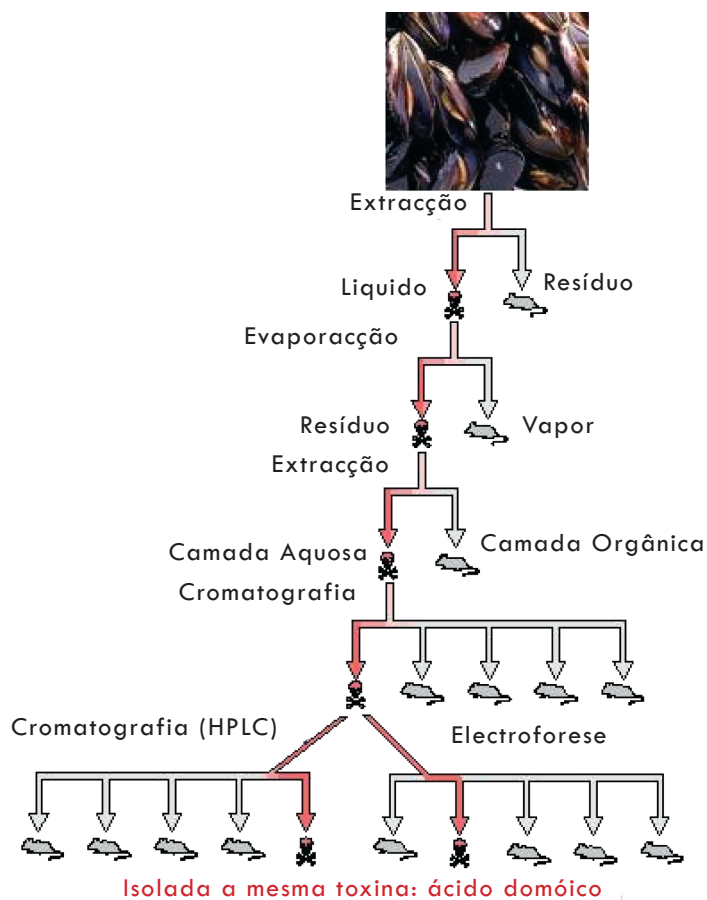
Ensaaios com ratos mostraram que os mexilhões causavam a sua morte, acompanhada de sintomas neurotóxicos nunca antes vistos e muito diferentes dos encontrados com outras toxinas de origem marinha. Tratava-se de algo completamente novo que desafiou os cientistas que não sabiam a que composto tóxico atribuir estes sintomas.

O mistério começou a ser desvendado no dia 12 de Dezembro de 1987, quando uma equipa de biólogos marinhos e químicos foi reunida pelo *Department of Fisheries and Oceans* do Canadá no laboratório do Conselho Nacional de Investigação Científica do Canadá, em Halifax, Nova Scotia.

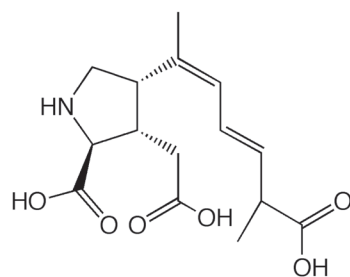
Esta epopeia química, contada em detalhe em vários artigos científicos, assentou no fraccionamento de extractos dos mexilhões e seu teste em ratos até se encontrar o vilão – o ácido domóico.

A implicação do ácido domóico na intoxicação do tipo amnésico (ASP), foi demonstrada após um estudo exaustivo realizado em apenas 4 dias! A tarefa desta equipa foi mais complicada que encontrar a proverbial “agulha num palheiro” e constitui uma verdadeira proeza química dada a enorme quantidade de compostos presente nos mexilhões e o facto de os investigadores não terem a mínima ideia de qual a estrutura do agente responsável pela intoxicação.

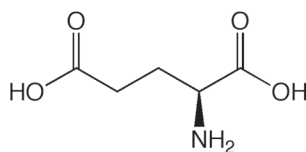
O ácido domóico funciona como um “Cavalo de Tróia molecular”. Os neurónios confundem este aminoácido com o seu parente ácido glutâmico, ou antes, confundem as formas básicas de ambos. O glutamato é um neurotransmissor excitatório que se pensa estar envolvido em funções cognitivas como a aprendizagem e a memória.



As membranas dos neurónios e da glia possuem transportadores de glutamato que retiram rapidamente este aminoácido do espaço extracelular já que o seu excesso é altamente tóxico para os neurónios. A acumulação de glutamato no espaço extracelular provoca a entrada de iões cálcio ( $\text{Ca}^{2+}$ ) nas células originando danos neuronais e eventualmente morte celular (apoptose) num processo conhecido por excitotoxicidade. De facto, elevadas concentrações de glutamato funcionam como uma excitotoxina - excitam os neurónios até à morte num processo em cascata que estimula células vizinhas. A estrutura mais rígida do ácido domóico faz com que se ligue mais fortemente aos receptores de glutamato. Como resultado, o poder excitatório do domoato é entre 30 a 100 vezes maior do que o do glutamato. Alguns cientistas consideravam na altura que o ácido domóico, isolado em 1958 a partir de uma alga vermelha, *doumoi* ou *hanayanagi*, usada como tratamento tradicional para combater parasitas intestinais no Japão, não poderia ser o culpado pelo ASP já que não existiam na literatura nenhunas indicações de toxicidade da alga ou de extractos da alga. Mas os extrac-



Ácido domóico



Ácido glutâmico

tos utilizados como remédios contêm no máximo 20 mg de ácido domóico enquanto algumas das vítimas do episódio de 1987 consumiram cerca de 290 mg de ácido domóico acumulado nos bivalves que se alimentaram de diatomáceas *Pseudonitschia*.

Desde 1987 que a análise de ácido domóico em marisco e peixe comerciais é um procedimento habitual e não há registos de mais intoxicações amnésicas.

Mas embora sem repercussões na saúde humana, a florescência regular destas algas microscópicas que tem ocorrido nos últimos anos tem consequências trágicas na fauna marinha, nomeadamente da costa californiana, afectando leões marinhos, golfinhos, baleias e pelicanos, entre outros.

As dimensões que este problema começa a assumir e o facto de a bioacumulação de toxinas produzidas pelo fitoplâncton não se restringir ao ácido domóico, tornam premente que todos nos apercebamos quão vulneráveis estamos se não fizermos algo para salvar os nossos oceanos!

### PLANTAS (POUCO) "ANGÉLICAS"

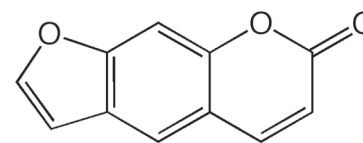
O que têm em comum a planta do arcanjo Gabriel, a cenoura-brava, a lima e detectives químicos? Uma história e um pouco de história.

Lesões de berloque quase motivaram que uma criança fosse tirada aos pais. As lesões da criança de 9 anos foram confundidas com violência infantil e foi necessário uma "investigação química" para mostrar a inocência dos pais. Estes eram adeptos de produtos naturais e perfumaram a criança de manhã com uma essência contendo óleo de bergamota antes de a levarem à praia. Descobriu-se que aquelas lesões eram induzidas por psoralenos.

Durante as grandes epidemias de peste na Europa surgiu uma lenda segundo a qual o arcanjo Gabriel indicara a angélica, que começa a florescer na altura da festa em sua honra, em 8 de Maio, como panaceia para a maleita. Monges e frades começaram a cultivá-la nos seus conventos, com o fim de com ela preparar uma forma de combate à epidemia, normalmente na forma de licor alcoólico.

Estes remédios medievais perpetuam-se nos licores Benedictine e Chartreuse, em que se utiliza a planta a que Paracelso durante a epidemia de peste em Milão de 1510 chamou «erva medicinal maravilhosa».

A angélica, *Angelica archangelicum*, é uma umbelífera, uma família de



Psoraleno

mente muito bronzeados e na década de 1950 um americano de nome John Howard Griffin beneficiou deste efeito para se tornar tão bronzeados que passou por negro.

Griffin escreveu um livro fundamental no entendimento das tensões étnicas nos Estados Unidos. «Black Like Me» relata as suas experiências coloridas pelos psoralenos no sul profundo dos EUA, na região conhecida como cinturão bíblico (e na época centro do Ku Klux Klan e afins).

A hiperpigmentação, propositada ou acidental, não é a única consequência do contacto com estes compostos químicos. Podem dar origem a fitofotodermatites, isto é, reacções fototóxicas como eritemas e erupções acompanhadas de pigmentação excessiva da pele responsáveis pelo aumento de consultas de dermatologia no Verão.

Em pessoas particularmente sensíveis, as perturbações podem ser acompanhadas de intenso prurido, febre e dores de cabeça. Os principais culpados por estas perturbações cutâneas são normalmente umbelíferas, por exemplo, para além das já referidas, cenoura-brava, erva-cicutária, canabrás e pastinaga-urticante. O aipo, cujo consumo cru entrou recentemente na moda, pode ser outro dos culpados.

Assim, na altura da colheita, é normal os trabalhadores apresentarem dermatites nos dedos, mãos e antebraços devido ao contacto do aipo com a pele mas o mesmo pode acontecer a um consumidor mais frequente deste vegetal.

De facto, os psoralenos não se encontram na natureza apenas em umbelíferas. A lima é outro citrino rico em psoralenos e por isso se recomenda a todos que lavem bem as mãos se mexerem nestas limas (não vá alguém pensar que os maltratámos nesta sessão...).

plantas que nos fornece condimentos como a salsa, coentros, aipo, aneto ou endro, cuminhos, anis, funcho, etc., usados desde tempos imemoriais para tratar uma série de aflições. Para além da angélica, muitas destas plantas aromáticas estão associadas a lendas curiosas. Por exemplo na Grécia antiga, acreditava-se que

como o estragol - presente na salsa e outras umbelíferas mas também em labiadas como o manjeriço ou a sálvia - o eugenol ou o anetol. Existem nestas plantas muitos outros compostos químicos, entre eles flavonóides, lactonas macrocíclicas, cumarinas e, em grande quantidade, compostos de características deveras interessantes,



um caule do funcho louvado por Pitágoras teria sido usado por Prometeu para roubar o fogo dos deuses. Nos Açores e na Madeira é espontânea uma variante de caules mais suculentos e doces e com menor concentração de óleos essenciais, designada *F. vulgare azoricum*. A sua abundância na ilha da Madeira está na origem do nome da capital, o Funchal.

Os compostos que dão aroma e sabor às umbelíferas são na sua maioria terpenos: sesquiterpenos (bisabolol, bisaboleno, beta-cariofileno, p.e.), monoterpenos como os felandrenos e pinenos ou monoterpenos fenólicos

as furanocumarinas ou psoralenos. Os psoralenos têm o efeito de nos sensibilizar à luz do sol, o que pode ser útil no tratamento de algumas doenças da pele como a psoríase mas têm a contra-indicação de serem mais perigosos em termos de cancro de pele do que a radiação ultravioleta apenas. Em 1916, um cientista alemão, de seu nome Freund, observou lesões da pele em mulheres a que chamou lesões berloque. Freund atribuiu estas lesões ao uso de água de colónia contendo óleo de bergamota embora não se tenha apercebido da indução fotoquímica das mesmas. Um banho de sol com psoralenos torna-nos real



## SUGESTÃO PARA UMA ACTIVIDADE PRÁTICA DE LABORATÓRIO SOBRE OXIDAÇÃO-REDUÇÃO

MÁRIO VALENTE\* E HELENA MOREIRA

*O programa da disciplina de Física e Química A - nível 2 refere o estudo dos processos de oxidação-redução de uma forma qualitativa. No presente artigo propõe-se a realização de um trabalho prático simples mas bastante didático. Note-se que este trabalho prático pode ser efectuado com meios rudimentares, em qualquer laboratório escolar.*

### INTRODUÇÃO

No ponto 2.3. (Chuva ácida) da componente de química do programa da disciplina de Física e Química A - nível 2 [1] vem referido o estudo qualitativo dos processos de oxidação-redução. A actividade laboratorial aqui proposta incide particularmente sobre os seguintes pontos do referido programa:

- “Caracterizar o impacto dos ácidos sobre alguns metais como uma reacção de oxidação-redução onde um dos produtos é o hidrogénio gasoso”,
- “Interpretar uma reacção de oxidação-redução em termos de transferência de electrões”,
- “Reconhecer que a oxidação envolve cedência de electrões e que a redução envolve ganho de electrões”,
- “Associar a ocorrência de uma reacção ácido - metal à possibilidade do metal se oxidar com redução simultânea do ião hidrogénio”.

Esta actividade prática de laboratório consiste numa sequência de três experiências nas quais os alunos poderão verificar vários processos de oxidação-redução e relacionar os poderes redutores e poderes oxidantes das várias espécies intervenientes.

Antes de mais convém lembrar aos alunos que no decurso de um processo de oxidação-redução ocorrem trocas de electrões entre duas espécies, e que a perda de electrões se denomina **oxidação**, e o ganho de electrões se denomina **redução**. Uma

espécie que perca electrões, isto é, que se oxide, denomina-se **agente redutor** (pois cede electrões a outra, reduzindo-a) e uma espécie que ganhe electrões, isto é, que se reduza, é denominada de **agente oxidante** (pois captura electrões de outra espécie, oxidando-a). Assim, sempre que ocorra uma oxidação, ocorrerá também uma redução, e *vice-versa*.

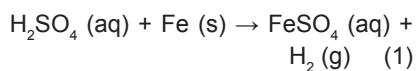
Em duas das experiências faz-se uso de di-hidrogénio (ou hidrogénio molecular). Este é um gás que forma muito facilmente misturas extremamente explosivas com o ar e a obediência às regras de segurança é, por isso, de grande importância (ver nota de segurança).

#### EXPERIÊNCIA 1:

#### A REACÇÃO ENTRE O FERRO E O ÁCIDO SULFÚRICO

Num balão de kitasato, com um tubo de borracha de cerca de 50 cm de comprimento fixo na tubuladura lateral, coloca-se cerca de 2 g de lâ de aço (fina) e 20 ml de água. Adicionam-se, de seguida, ao conteúdo do balão, 50 ml de uma solução de ácido sulfúrico em água (1:1 em volume – **ver nota de segurança**). Com uma rolha de borracha tapa-se a boca do balão de kitasato.

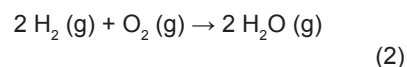
A reacção entre o ácido sulfúrico e o ferro, traduzida pela equação



é rápida, devido à grande superfície reaccional proporcionada pela lâ de aço, sendo muito nítida a libertação de di-hidrogénio.

Para reconhecer a presença de di-hi-

drogénio enche-se um tubo de ensaio com o gás que sai pela extremidade livre do tubo de borracha (a recolha deve ser feita com o tubo de ensaio invertido). Após cerca de 10 a 20 segundos retira-se o tubo de ensaio (que é sempre mantido invertido) e, a uma distância de pelo menos um metro da montagem, aproxima-se da sua boca a chama de um fósforo. Observar-se-à a ocorrência de um rápido silvo ou uma pequena explosão, conforme o tubo esteja cheio de di-hidrogénio ou contenha ainda um pouco de ar. A combustão do di-hidrogénio no ar é traduzida pela equação:



e é extremamente exoenergética.

#### EXPERIÊNCIA 2:

#### A REDUÇÃO DO ÓXIDO DE COBRE (II) PELO DI-HIDROGÉNIO

Fixa-se à extremidade livre do tubo de borracha da montagem anterior um tubo de vidro resistente com um comprimento de aproximadamente 20 cm, que trespassa uma rolha de borracha para poder ser facilmente fixo num suporte universal (Figura 1).

A meio desse tubo de vidro coloca-se uma pequena quantidade de óxido de cobre (II) tendo o cuidado de evitar que ocupe toda a secção do tubo, entupindo-o.

Por fim, fixa-se outro tubo de borracha, de pelo menos 50 cm de comprimento, à extremidade livre do tubo de vidro.

A montagem final encontra-se representada na Figura 1.

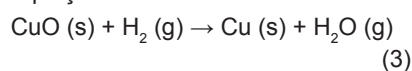
Colégio D. Duarte, Rua Visconde de Setúbal, 86, 4200-497 Porto  
\*madmage1@yahoo.com



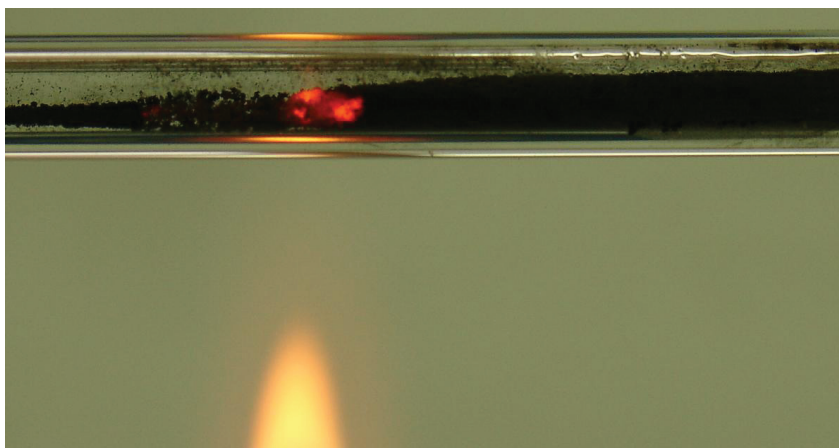
**Figura 1** Montagem para a preparação de di-hidrogénio e redução de óxido de cobre (II)

Poderá, agora, ser aconselhável adicionar mais lã de aço ao conteúdo do balão de kitasato, caso a formação de di-hidrogénio seja lenta ou tenha cesado por completo.

Para que a redução do óxido de cobre (II) se inicie é necessário um aquecimento inicial deste, que pode ser conseguido, por exemplo, com a chama de uma lamparina a álcool. Assim que o processo se inicie, o que se verifica pelo aparecimento de um ponto ao rubro (Figura 2), pode-se remover a lamparina já que a reacção é suficientemente exoenergética para se manter por si própria. A reacção observada pode ser traduzida pela equação



A formação de água pode ser confirmada pela observação de condensação nas partes frias do tubo de vidro, a jusante do local da reacção (Figura 2).

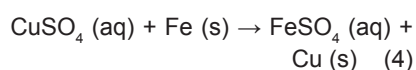


**Figura 2** Pormenor do tubo de vidro onde se pode observar a redução (exoenergética) de óxido de cobre (II) a cobre metálico

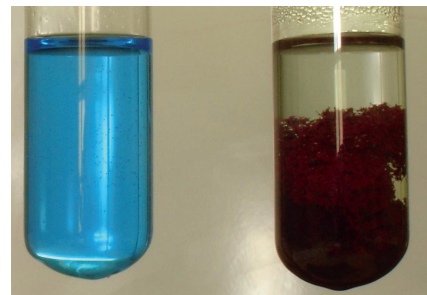
### EXPERIÊNCIA 3:

#### A REACÇÃO ENTRE O FERRO E O SULFATO DE COBRE (II)

Num tubo de ensaio contendo uma solução de sulfato de cobre (II) coloca-se alguma lã de aço, observando-se a rápida formação de cobre metálico, de cor característica, à sua superfície, de acordo com a equação:



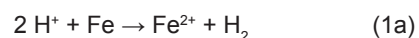
Se a lã de aço for suficiente para reagir com todo o ião cobre, a cor da solução passará de azul, cor característica do ião cobre (II) em solução aquosa, para verde claro (Figura 3, tubo da direita), cor característica do ião ferro (II) em solução aquosa.



**Figura 3** Tubos de ensaio contendo, à esquerda, uma solução de sulfato de cobre (II) e, à direita, solução de sulfato de ferro (II) e um depósito de cobre metálico

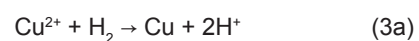
### DISCUSSÃO

Todos os processos químicos realizados nesta sequência de experiências são de oxidação-redução. Assim, para a reacção de ferro com o ácido sulfúrico (ou mais propriamente com o  $\text{H}^+$  originado pela ionização deste em água), a equação 1 pode ser reescrita de forma a apresentar apenas as espécies directamente envolvidas, isto é:



Nesta equação pode-se observar que dois catiões hidrogénio ao serem convertidos em di-hidrogénio – uma redução – capturam os dois electrões que são libertados pelo ferro ao ser convertido em catião ferro (II) – uma oxidação. Como resultado, os alunos podem concluir que **o catião hidrogénio é um oxidante mais poderoso que o catião ferro (II)** e, portanto, que **o di-hidrogénio é um redutor mais fraco que o ferro**.

Na descrição da experiência da redução do óxido de cobre (II) a equação 3 também pode ser reescrita apresentando apenas as espécies intervenientes, segundo:

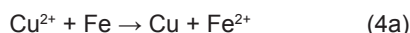


O catião cobre (II) captura dois electrões convertendo-se em cobre metálico. Os dois electrões são cedidos pelo di-hidrogénio que é convertido em dois catiões hidrogénio, que rapidamente se ligam ao anião óxido (do óxido de cobre) para formar água.

Note-se que a água não é uma substância iónica: o ião óxido partilha um par de electrões de valência com cada catião hidrogénio.

Desta experiência os alunos podem concluir que **o di-hidrogénio é um redutor mais poderoso que o cobre** e, portanto, que o **catião hidrogénio é um oxidante mais fraco que o catião cobre (II)**.

Para a terceira experiência, a equação 4 também pode ser reescrita apresentando apenas as espécies intervenientes, segundo:



Neste processo o catião cobre (II) captura dois electrões convertendo-se em cobre metálico. Os dois electrões são cedidos pelo ferro que é convertido em catião ferro (II), de onde os alunos poderão concluir que **o ferro é um redutor mais poderoso que o cobre** e, portanto, que o **catião ferro (II) é um oxidante mais fraco que o catião cobre (II)**.

Após análise dos resultados os alunos podem facilmente estabelecer séries comparativas de poderes redutores ( $\text{Cu} < \text{H}_2 < \text{Fe}$ ) e de poderes oxidantes ( $\text{Fe}^{2+} < \text{H}^+ < \text{Cu}^{2+}$ ).

#### QUESTÕES / DESAFIOS

De seguida sugerem-se algumas questões pertinentes que testam o

poder de observação e a capacidade de relacionar e operacionalizar conceitos, por parte dos alunos.

- Por que razão se recolheu o di-hidrogénio num tubo de ensaio invertido?
- Será que se pode obter ferro metálico da mesma forma que se obteve o cobre metálico?
- Será que o cobre reage com ácidos diluídos?
- A solução resultante da reacção entre a lâ de aço com ácido sulfúrico é também verde clara mas observa-se a presença de uma substância negra em suspensão. O que poderá ser (investigue-se a composição do aço)?

#### CONCLUSÃO

Consideramos a presente sequência de experiências bastante enriquecedora, já que permite aos alunos observar a ocorrência de vários processos de oxidação-redução que estão interligados, pois envolvem essencialmente três elementos: o cobre, o hidrogénio e o ferro. Como resultado, é-lhes possível estabelecer comparações entre os resultados das várias experiências e chegar a conclusões que possuem poder preditivo.

#### NOTAS DE SEGURANÇA

A primeira experiência envolve a utilização de uma solução aquosa (1:1 em volume) de ácido sulfúrico. Essa solução é preparada adicionando o ácido concentrado, em pequenas quantidades, à água. A adição deve ser acompanhada de uma agitação eficaz de modo a dissipar o calor gerado aquando da dissolução. Devido aos perigos inerentes, esta solução deverá ser preparada pelo professor. Duas das três experiências propostas envolvem di-hidrogénio, que é um gás que forma muito facilmente misturas explosivas com o ar, pelo que se deverá ter o cuidado acrescido de **nunca permitir a presença de chamas na proximidade (~1 m) do aparelho onde o di-hidrogénio é gerado**.

No decurso das experiências a utilização de batas e óculos de segurança é obrigatória.

#### REFERÊNCIA

- [1] Programa da disciplina de Física e Química A (nível 2) 11º ou 12º anos:  
[http://www.dgidc.min-edu.pt/programas/prog\\_eg.asp](http://www.dgidc.min-edu.pt/programas/prog_eg.asp)

## CURIOSIDADES - ENERGIA FOTOVOLTAICA

No dia 2 de Junho, o gigante alemão Bosch anunciou que vai comprar 50,45% da companhia alemã de energia solar Ersol. A Bosch vai investir mais de 546 milhões de euros na primeira operação de aquisição de uma empresa produtora de células solares por um grande grupo. A Alemanha é o país com mais capacidade fotovoltaica instalada. A Ersol produz células de silício cristalino e de silício microcristalino em filme fino e é, a par das suas congéneres alemãs Conergy e Q-Cells, uma das maiores companhias de produção de células fotovoltaicas com um volume de vendas que em 2008 se prevê ser na ordem dos 300 milhões de euros. O anúncio da Bosch surgiu uns dias antes do início

da maior feira de energia solar a nível mundial, a Intersolar, que teve lugar de 10 a 14 de Junho em Munique e menos de uma semana depois de a Q-Cells ter anunciado que vai investir cerca de 3,5 mil milhões de euros numa unidade de produção no México, destinada a fornecer o mercado norte-americano e a América Latina. As previsões indicam que a primeira fase do projecto, que produzirá células de filme fino, estará finalizada em 2009. A Conergy anunciou igualmente uma reestruturação da empresa que passou pela venda das suas subsidiárias consideradas não estratégicas, como sejam as destinadas à produção de células solares para aquecimento. A reestruturação da empresa tem como

objectivo a dedicação exclusiva à produção de energias alternativas, com especial ênfase na energia fotovoltaica mas igualmente na produção de turbinas eólicas.

O investimento massivo no sector da energia fotovoltaica, de que o anúncio da Q-Cells é apenas um exemplo, resultará num drástico aumento da capacidade produzida, que passará dos cerca de 3 gigaW em 2007 para 15-20 gigaW em 2010. Os analistas preveem, em consequência, que os preços das células fotovoltaicas irão cair num futuro próximo o que aumentará a competitividade desta energia alternativa.

PS

# 1<sup>ST</sup> Portuguese Young Chemists Meeting PYChem



**15-17  
October 2008**

**INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO – LISBON  
IST Congress Center**

O 1<sup>st</sup> Portuguese Young Chemists Meeting (1<sup>st</sup>PYChem), organizado pelo Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) terá lugar no Instituto Superior Técnico em Lisboa, entre 15 e 17 de Outubro de 2008.

Este encontro será um espaço privilegiado onde os jovens investigadores que se encontram em Portugal ou no estrangeiro, podem apresentar prioritariamente os seus trabalhos, conhecer o trabalho dos nossos colegas, discutir problemas e talvez criar ideias novas e colaborações futuras.

Teremos vários formatos de apresentação: comunicações orais, comunicações orais *flash* e posters. E a submissão de resumos já se encontra aberta.

O encontro contará ainda com 4 lições

plenárias sobre temas transversais às diversas áreas da química.

Os oradores das plenárias serão:

- Carlos Romão (Instituto de Tecnologia Química e Biológica / Universidade Nova de Lisboa): “*Coordination Chemistry: Trends and Challenges*”
- João Pedro Conde (Departamento de Engenharia Química e Biológica / Instituto Superior Técnico): “*Top-down nanotechnology: how to sculpt a nano-object*”
- João Rocha (Departamento de Química-CICECO / Universidade de Aveiro): “*New Light-Emitting Zeolites and Metal Organic Frameworks*”
- Stephen Caddick (Departamento de Química / University College London): “*Synthetic Chemistry: Un-*

*derpinning Science for Biology and Medicine*”

A juntar a este programa científico, teremos uma visita ao Museu da Ciência e o jantar do congresso, onde poderemos rever antigos colegas e amigos. Adicionalmente, teremos um espaço no programa do encontro dedicado exclusivamente a discutir os planos do Grupo de Químicos Jovens para o futuro.

**CONTAMOS COM A VOSSA PRESENÇA**

E-mail: [1pychem@spq.pt](mailto:1pychem@spq.pt)  
URL: [www.spq.pt/gqj/1pychem](http://www.spq.pt/gqj/1pychem)

# EYCN

## EUROPEAN YOUNG CHEMISTS NETWORK



A *European Young Chemists Network* (EYCN) escolheu a Alemanha para realizar no próximo ano o seu primeiro congresso, para o qual estão desde já convidados todos os jovens químicos portugueses.

A EYCN, criada a 1 de Abril de 2007 em Berlim, faz parte da *European Association for Chemical and Molecular Sciences* (EuCheMS). Os diversos países são representados por delegados das várias sociedades nacionais.

O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da SPQ tem como parte da sua missão assegurar essa representação, pelo que participou na primeira reunião anual de delegados que decorreu em Madrid a 19 de Março de 2008.

Nessa reunião fez-se um balanço do primeiro ano de actividades da rede, que consistiu na formalização desta organização e definição do seu âmbito de acção como parte da EuCheMS.

Assim, a EYCN tem como objectivo a criação de uma plataforma dentro da rede EuCheMS onde os jovens químicos

possam:

1. Gerar uma opinião estruturada a nível europeu sobre ciência, educação e política em áreas afins à química;
2. Discutir interesses comuns, criar e expandir novas iniciativas que contribuam de uma forma construtiva para o futuro da ciência e de uma forma mais geral para o desenvolvimento da sociedade europeia;
3. Formar uma rede de contactos que seja a génese de uma comunidade activa de jovens químicos na Europa;
4. Estabelecer novos laços entre a comunidade académica e a indústria.

Parte substancial da reunião de Madrid foi dedicada à apresentação das actividades dirigidas aos químicos jovens desenvolvidas e planeadas pelas várias Sociedades Químicas nacionais.

Na apresentação do GQJ da SPQ foi dada particular ênfase à realização do seu primeiro congresso em Outubro (1<sup>st</sup>PyChem) e referiu-se a futura pla-

nificação de actividades de divulgação da Química ao nível das escolas, bem como o desenvolvimento de bolsa de emprego e incentivo ao empreendedorismo.

Estas últimas duas ideias foram particularmente elogiadas pelos restantes delegados e direcção da EYCN.

Por fim, e considerando que a etapa de implementação da EYCN se encontra na sua fase final, foi discutida a forma de abrir a rede a todos os jovens químicos europeus.

Acções como a criação de um sítio na internet ([www.eycn.eu](http://www.eycn.eu)), a atribuição de prémios para jovens químicos, a criação de uma *newsletter* ou a divulgação das actividades da rede através dos representantes nacionais foram identificadas como essenciais para atingir esse objectivo.

O primeiro congresso a decorrer na Alemanha é parte essencial dessa estratégia.

Pedro M. P. Góis

## LIVROS RECENTEMENTE EDITADOS

Foi recentemente publicado pela *Royal Society of Chemistry* o livro "*Creating Networks in Chemistry: The Founding and Early History of Chemical Societies in Europe*".

Editado por Anita Kildebæk Nielsen e Sona Strbanova (Editoras), este livro tem por objecto de estudo o processo

de criação e desenvolvimento das Sociedades Europeias de Química.

Apresenta, recorrendo a material histórico único, as circunstâncias sociais, intelectuais e políticas em que as diversas sociedades foram criadas e de que forma condicionaram o seu funcionamento.

Contou com a colaboração de membros do Grupo de História e com o apoio da SPQ.

Pode obter mais informação em: <http://www.rsc.org/Shop/books/2008/9780854042791.asp>.

## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

### SUPERISOLANTE

Os supercondutores, materiais que em determinadas condições apresentam resistência eléctrica nula e que por essa razão são teoricamente capazes de sustentar indefinidamente uma corrente eléctrica sem qualquer fonte de tensão externa, são materiais já conhecidos há décadas. No entanto, os seus materiais opostos, os superisolantes, eram totalmente desconhecidos até agora. Um material deste tipo, que apresenta propriedades eléctricas contrárias aos supercondutores, ou seja, resistência eléctrica extremamente elevada a temperaturas próximas do zero absoluto em relação ao seu valor à temperatura ambiente (100000 vezes superior, neste caso), foi apresentado recentemente por uma equipa de investigadores.

Valerii Vinokur, do *Argonne National Laboratory* e a sua colega Tatyana Baturina, juntamente com outros cien-

tistas de Argonne e colaboradores da Bélgica, Alemanha e Rússia, prepararam um filme muito fino de nitreto de titânio de forma a obterem um material com características superisolantes. A teoria aceita que explica a supercondutividade, aplicável neste caso ao nitreto de titânio, baseia-se no conceito de par de Cooper. Assim, nos supercondutores, abaixo de determinados valores de temperatura e de campo magnético aplicado (designados por temperatura crítica e por campo crítico), os electrões organizam-se em pares, movimentando-se praticamente sem restrições, reduzindo a resistência a um fluxo de corrente eléctrica até valores praticamente nulos. Vinokur explica que os filmes de nitreto de titânio, tais como de outros materiais, podem comportar-se não como supercondutores mas sim como superisolantes se a sua espessura for suficientemente fina. No caso de um filme muito fino de nitreto de titânio, abaixo da temperatura crítica e campo crítico, os electrões originam pares

de Cooper, mas estes não se podem movimentar, originando um estado com uma resistência eléctrica teoricamente infinita.

Tal como os supercondutores, que têm vasta aplicação em equipamentos tecnológicos (como aceleradores de partículas, espectrómetros, comboios de levitação magnética, etc), os superisolantes podem também ser aplicados na protecção de todos os tipos de circuitos eléctricos e electrónicos, sensores e baterias (de forma a evitar descargas prematuras ou curto circuitos). A encapsulação de um fio supercondutor com um material superisolante criaria um dispositivo eléctrico virtualmente perfeito com perdas de energia por calor praticamente nulas. Versões miniaturizadas destes fios supercondutores superisolados poderiam conduzir ao desenvolvimento de circuitos eléctricos de maior eficiência. (adaptado de *webzine Reactive Reports 73*, 2008).

Paulo Brito

## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

### URÂNIO ORGÂNICO

A primeira molécula de metino de urânio (*uranium trifluoride methylidyne*) foi sintetizada por químicos norte-americanos. Esta nova estrutura contém uma ligação tripla urânio-carbono, detectada pela primeira vez. Um metino é um grupo funcional trivalente CH, em que, além da ligação simples ao átomo de hidrogénio, o carbono pode ainda estabelecer uma ligação tripla.

Lester Andrews da *University of Virginia* e os seus colaboradores trabalham no campo da química do urânio há quinze anos, tendo sintetizado dúzias de moléculas diferentes.

Assim, o seu conhecimento da reactividade do urânio é bastante extenso. Para obter este último composto, necessitaram de recorrer a um laser

pulsado para evaporar urânio empobrecido numa câmara de vácuo, que reagiram com fluorofórmio (ou trifluorometano,  $\text{CHF}_3$ ).

Posteriormente, usaram uma atmosfera de argon a 8 K para fixar as moléculas do novo composto. Andrews explica que o átomo de urânio introduz-se numa ligação carbono-flúor, rearranjando os restantes átomos de flúor de forma a se obter uma nova estrutura. De seguida, a equipa usou espectroscopia de infra-vermelho para caracterizar esta exótica e instável ligação tripla urânio-carbono.

Através da espectroscopia de infra-vermelho, a equipa estimou a estrutura e as propriedades de ligação do novo composto e comparou a simulação com os resultados espectroscópicos, tendo concluído que o ajuste era

suficientemente bom para confirmar a obtenção da estrutura pretendida.

Adicionalmente, Andrews acrescenta que as propriedades dos compostos de urânio não deveriam interessar apenas aos químicos, mas também aos próprios políticos.

Assim, na sua opinião, sabendo-se da necessidade de submeter o minério de urânio a processos químicos bastante complexos para que este possa ser aplicável como material nuclear, tal torna imperativo um melhor conhecimento da sua química. (adaptado de *webzine Reactive Reports 70*, 2007).

Paulo Brito

## CHAPERONES MOLECULARES - OS MESTRES DO ORIGAMI

PAULA C. RAMOS<sup>1\*</sup>, ANA C. MATIAS<sup>1,2</sup> E ANTÓNIO J. MARQUES<sup>2</sup>

Uma proteína acabada de ser sintetizada só se torna funcionalmente activa após adquirir a sua estrutura tridimensional nativa. Como é que isso acontece? Embora a informação estrutural de uma proteína esteja contida na sua sequência de resíduos de aminoácidos, as evidências vão crescendo de que a aquisição eficiente de uma estrutura nativa funcional depende, em muitos casos, de uma maquinaria celular complexa que envolve chaperones moleculares e hidrólise de ATP. Se a informação para a obtenção da estrutura de uma proteína é inerente à sua sequência, porque é que os chaperones são necessários? Os chaperones têm como função proteger as cadeias polipeptídicas não nativas de mau-enrolamento e de agregação, servir de catalisadores do enrolamento ou re-enrolamento de uma cadeia polipeptídica na sua estrutura nativa, ou evitar/reverter interacções incorrectas durante, por exemplo, condições de stress. A compreensão de como milhares de proteínas diferentes sintetizadas numa célula utilizam a maquinaria dos chaperones moleculares começa a ter profundas implicações na biotecnologia e medicina.

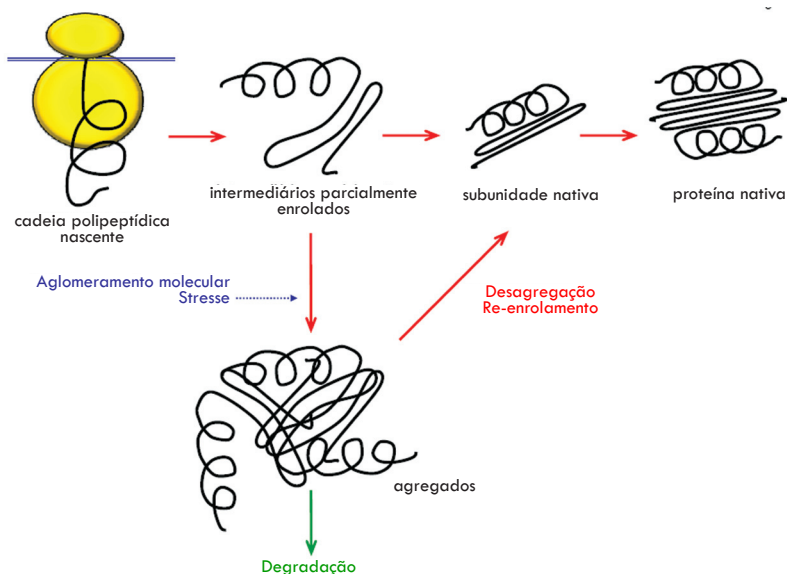
**PALAVRAS-CHAVE:** Chaperones, enrolamento de proteínas (folding), proteínas de choque térmico, controlo de qualidade

## INTRODUÇÃO

As proteínas acabadas de ser sintetizadas têm de adquirir a sua estrutura tridimensional característica. Apenas uma conformação é extremamente estável e possui as propriedades químicas exactas que permitem que a proteína desempenhe a sua função específica na célula. As proteínas são enroladas de uma forma tão precisa que nalguns casos basta a mudança de um resíduo de aminoácido para perderem a função. Embora esteja provado por experiências *in vitro* que toda a informação necessária ao correcto enrolamento (*folding*) de uma proteína está contida na sua sequência polipeptídica [1], o enrolamento nativo de proteínas dentro das células não é, na generalidade, um processo espontâneo [2]. Ao longo dos últimos anos as evidências são cada vez maiores de que muitas proteínas recém-sintetizadas necessitam de uma maquinaria celular complexa de *chaperones* moleculares e energia metabólica para alcançarem os seus estados nativos eficientemente. A questão que se coloca é a seguinte: se a informação para o enrolamento de uma proteína é inerente à sua sequência,

então porque é que os *chaperones* moleculares são necessários? Os *chaperones* moleculares têm como função proteger as cadeias polipeptídicas nascentes, evitando o mau-enrolamento e agregação de proteínas. A agregação é um problema para as cadeias nascentes que ainda não adquiriram a sua estrutura nativa (Figura 1). Quando uma cadeia nascente é libertada do ribossoma, resíduos hidrofóbicos (normalmente protegidos no interior da proteína), podem ficar expostos e a cadeia, em vez de se enrolar apropriadamente, pode-se associar (agregar) a outras cadeias nascentes que

possuem também resíduos hidrofóbicos expostos. Pensa-se que na célula as proteínas em estados não-nativos têm grande tendência para agregar devido à elevada concentração local de proteínas nascentes nos polirribossomas. Se tomarmos em atenção que o citosol é um meio atulhado de proteínas e outras macromoléculas, a propensão para a agregação de cadeias proteicas não-nativas encontra-se aumentada pela sua concentração efectiva. O “aglomeramento macromolecular” (*molecular crowding*) fornece uma força não específica para a compactação e associação macromole-



**Figura 1** Destinos de uma proteína acabada de sintetizar: aquisição de estrutura nativa e funcional (enrolamento); intermediários parcialmente enrolados são altamente susceptíveis de sofrerem agregação devido ao aglomerado molecular característico da célula ou em condições de stress. Os agregados podem sofrer desagregação e re-enrolamento por acção de *chaperones* ou serem conduzidos a degradação. Setas encarnadas, participação de *chaperones*. Seta verde, acção de sistemas proteolíticos

<sup>1</sup> Departamento de Química, Bioquímica e Farmácia, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade do Algarve, Campus de Gambelas, 8005-139 Faro, Portugal

<sup>2</sup> Institute for Genetics, University of Cologne, Zùlpicher Str. 47, D-50674 Cologne, Germany

\* E-mail: pcramos@ualg.pt

cular que inclui o colapso de cadeias polipeptídicas durante o enrolamento (Figura 1). A agregação remove proteínas irreversivelmente das suas vias produtivas de enrolamento e deverá ser evitado *in vivo* pelos *chaperones* moleculares [3]. O re-enrolamento espontâneo *in vitro* é normalmente eficiente para proteínas pequenas com um único domínio. Os resíduos de aminoácidos hidrofóbicos expostos são em milissegundos protegidos no seu interior, logo no início do enrolamento [2]. Ao contrário, proteínas grandes, compostas por vários domínios, frequentemente enrolam-se de uma forma ineficaz, devido à formação de intermediários parcialmente enrolados, incluindo estados mal enrolados, que tendem a agregar [2].

As células necessitam da actividade dos *chaperones* moleculares não só para prevenir a agregação de proteínas com conformação não-nativa, durante a aquisição da sua estrutura aquando da sua síntese, mas também para evitar e/ou reverter interacções incorrectas que ocorrem por exemplo, em condições de stresse, tais como temperaturas elevadas, que provocam o desenrolamento das proteínas expondo superfícies que normalmente estão protegidas no interior. A ligação a um *chaperone* poderá não somente bloquear agregação directa entre as moléculas através de protecção das superfícies interactivas nos polipéptidos não-nativos, incluindo as de subunidades não montadas, como também evitar ou reverter mau enrolamento dentro da própria molécula. Para além de protegerem áreas potencialmente reactivas na sequência polipeptídica, os *chaperones* funcionam também como catalisadores no processo de enrolamento. Tendo em conta que numa bactéria, cujo tempo de duplicação pode estar abaixo de 30 minutos, são sintetizados mais de 30 000 polipéptidos por minuto, a transposição das barreiras energéticas de estados de alta energia (polipéptidos desenrolados) para estados de baixa energia (conformações nativas), induzidas apenas por interacções com o ambiente citosólico, não seria suficientemente rápida e eficaz para permitir a viabilidade celular, especialmente se considerados os polipéptidos maiores que 30kDa. Alguns *chaperones* en-

volvem as cadeias, isolando-as total ou parcialmente do meio exterior e criando o ambiente ideal para que a aquisição das conformações nativas (de alta para baixa energia) ocorra rapidamente e sem interferências [2].

Muitos *chaperones*, embora sejam expressos constitutivamente, são sintetizados em concentrações elevadas em condições de stresse e por isso são classificados como proteínas de stresse ou de choque térmico (*heat shock proteins* – Hsp). Mas existem *chaperones* que não são proteínas de stresse, bem como existem proteínas de choque térmico que não são *chaperones*. São conhecidos até à data numerosos *chaperones*, mas certamente existirão outros por caracterizar. Existem *chaperones* que são específicos para uma função, como por exemplo o *trigger factor* (TF), e outros que são multivalentes e actuam em vários processos como os Hsp70. Os *chaperones* assistem uma vasta variedade de processos, por exemplo: 1) enrolamento de proteínas nascentes e acabadas de sintetizar; 2) desagregação de proteínas; 3) transdução de sinais; 4) translocação de proteínas do citoplasma para organelos; 5) controlo de qualidade das proteínas; 6) montagem de complexos proteicos.

1. Enrolamento de proteínas nascentes e acabadas de sintetizar

O ribossoma, organelo responsável pela tradução das cadeias polipeptídicas, possui uma subunidade grande cujo comprimento do canal de saída

do polipéptido é de 100Å – o comprimento de uma cadeia distendida com cerca de 30 resíduos de aminoácidos ou uma hélice  $\alpha$  com cerca de 65 resíduos [4]. A largura do canal tem em média 15Å, e em princípio, enrolamentos para além de hélices não são espacialmente permitidos dentro do ribossoma [4].

O TF, os Hsp70s e a prefoldina são *chaperones* que se ligam a cadeias polipeptídicas nascentes. Estes *chaperones* são responsáveis pela estabilização das cadeias em elongação nos ribossomas assegurando que se mantenham num estado não agregado (Figura 2). No citoplasma, o processo de enrolamento da cadeia polipeptídica prossegue com a libertação controlada dos factores que se associam ao ribossoma ou através da transferência das proteínas recém-sintetizadas para outros *chaperones* como, por exemplo as chaperoninas (ver abaixo).

#### A - Chaperones de ligação ao ribossoma

O TF é uma proteína de 48kDa, existente nas eubactérias, que se liga ao ribossoma numa proporção estequiométrica de 1:1 e interage com cadeias emergentes do ribossoma tão pequenas como 57 resíduos de aminoácidos, evitando assim o contacto entre segmentos hidrofóbicos e, portanto, mantendo as cadeias nascentes solúveis (Figura 2 e Figura 4A) [5]. O reconhecimento da cadeia polipeptídica alvo pelo TF é mediado por pequenas sequências ricas em resíduos hidro-

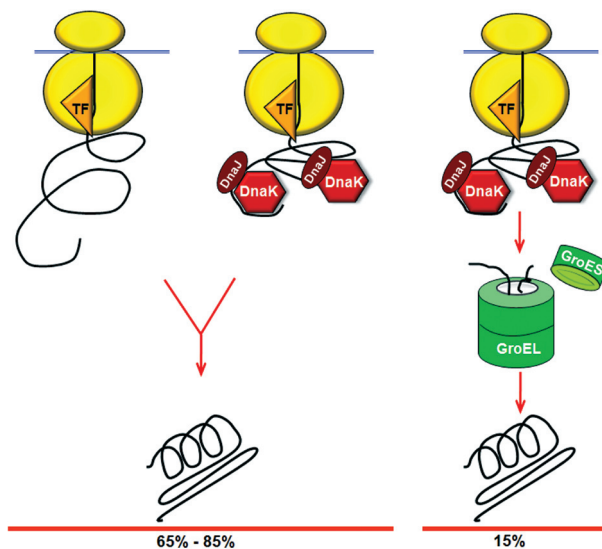


Figura 2 Vias de enrolamento de proteínas acabadas de sintetizar em bactérias e percentagens aproximadas da sua ocorrência



fóbicos/aromáticos. O TF dissocia-se do seu substrato (cadeia nascente) de uma forma independente de ATP, após a libertação da cadeia polipeptídica do ribossoma. O TF possui uma actividade de peptidil-prolil-*cis-trans* isomerase cuja relevância não é ainda compreendida e tem uma função de *chaperone* que se sobrepõe ao sistema Hsp70 bacteriano, DnaK e DnaJ (ver sistema Hsp70, abaixo), na estabilização de cadeias nascentes mantendo-as numa forma competente para subsequente enrolamento [6]. O citosol eucariota não possui TF, mas sim um complexo heterodimérico com duas subunidades  $\alpha$  (33kDa) e  $\beta$  (22kDa) designadas por NAC (*nascent chain-associated complex*), que se associa com pequenas cadeias acabadas de emergir do túnel do ribossoma. A dissociação ocorre após a cadeia ser libertada do ribossoma [7].

As leveduras de padeiro, bem como outros fungos, possuem uns homólogos de Hsp70 citosólicos especializados em ligar-se a cadeias polipeptídicas emergentes do ribossoma. Nos eucariotas, ditos superiores, são as próprias proteínas do sistema Hsp70 que actuam tanto co- como pós-traducionalmente. Em *Saccharomyces cerevisiae*, Ssb1 e Ssb2 interagem com o ribossoma e com pequenas cadeias nascentes [8]. Esta função das proteínas Ssb parece ser mediada por outra Hsp70, Ssz1, que forma um complexo estável com o ribossoma e a zutina, designado por RAC (*ribosome-associated complex*). Pensa-se que o RAC e as proteínas Ssb têm uma acção concertada em estabilizar cadeias nascentes.

#### B - O sistema Hsp70

Os membros típicos da família Hsp70 são *chaperones* monoméricos que não ligam ao ribossoma e se encontram presentes tanto no citosol de células eucarióticas e bacterianas e de algumas arqueobactérias, como em organelos eucariotas tais como mitocôndrias e retículo endoplasmático [3]. O citosol dos eucariotas ditos superiores contém homólogos de Hsp70 expressos constitutivamente (Hsc70 – *heat shock cognate protein 70*) e formas induzidas pelo stress (Hsp70). Na levedura de padeiro existem qua-

tro Hsp70 que não se ligam ao ribossoma e estão presentes no citosol, designadas por Ssa1 a Ssa4.

Os Hsp70 promovem o processo de enrolamento de segmentos peptídicos hidrofóbicos expostos pelas proteínas nos seus estados não nativos, através de ciclos de ligação/libertação do substrato regulados pela sua própria actividade ATPásica e por proteínas co-factores. O ciclo de ligação/libertação do substrato é conduzido pela mudança entre o estado de baixa afinidade para o ATP e o estado de elevada afinidade para o ADP (ver revisões de Young e colegas [9] e de Mayer e Bukau [10]). Este ciclo é controlado tanto por *co-chaperones* da família das Hsp40 (DnaJ), que dirigem os Hsp70 para os seus substratos, como por factores permutadores de nucleótidos que determinam o tempo de vida do complexo Hsp70-substrato.

O mecanismo de acção dos Hsp70 encontra-se bem estudado nas eubactérias. O Hsp70 de *Escherichia coli* é conhecido por DnaK, o seu *co-chaperone* é designado por DnaJ (pertence à família dos Hsp40) e o seu factor permutador de nucleótidos é conhecido por GrpE. O *chaperone* DnaK associa-se preferencialmente a polipéptidos enlongados maiores do que 20 a 30kDa e, portanto, actua nas cadeias nascentes subsequentemente ao TF (Figura 2). O DnaK possui um domínio com cerca de 44kDa no terminal N que tem função ATPásica e um domínio de ligação a péptidos no terminal C com cerca de 27kDa. Em termos de estrutura terciária, o terminal C possui um subdomínio em sanduíche  $\beta$  com um fenda de ligação ao péptido e um segmento em hélice  $\alpha$  tipo trinco (Figura 3A).

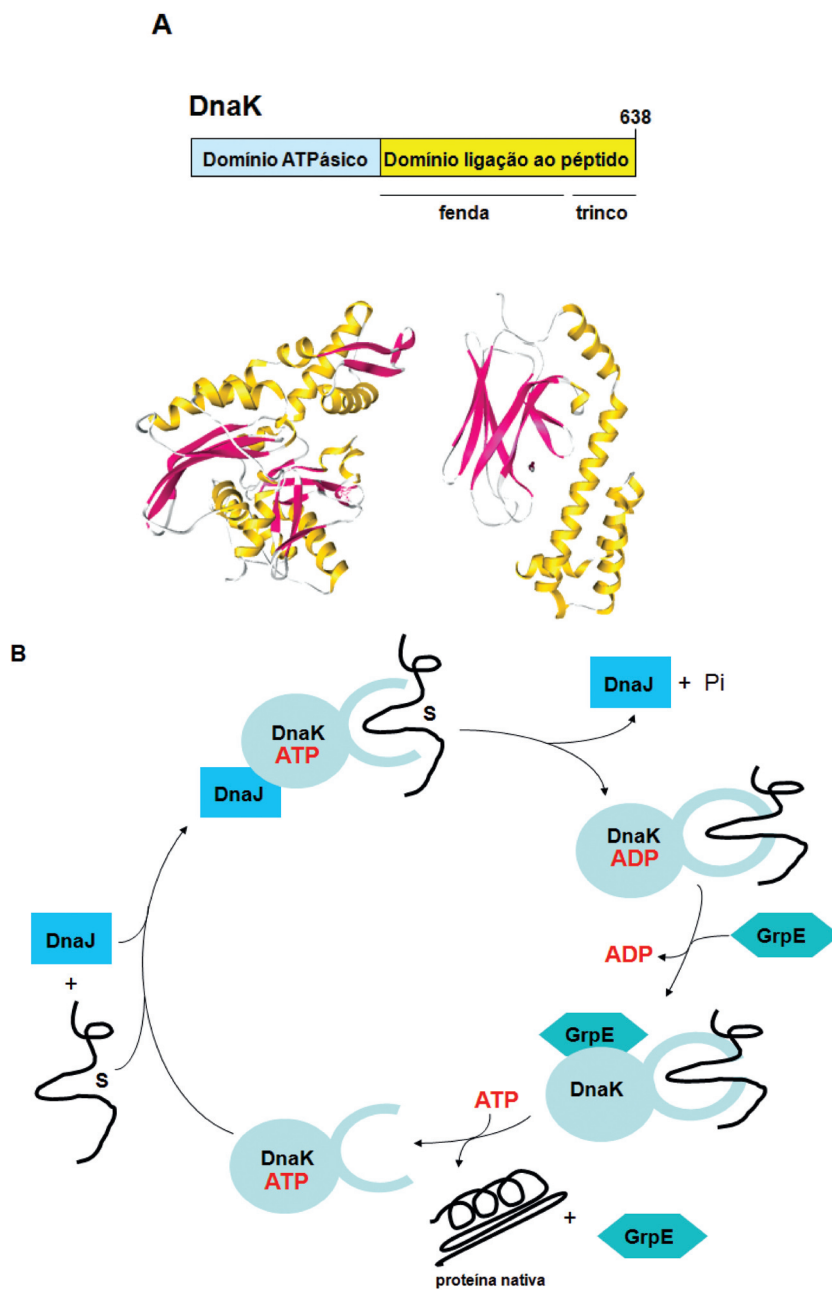
Os péptidos alvo contêm cerca de sete resíduos de comprimento e são tipicamente hidrofóbicos na sua região central, tendo a leucina e a isoleucina como resíduos preferenciais. Estatisticamente, numa proteína, estes resíduos encontram-se em média em cada 40 resíduos de aminoácidos. A ligação entre o péptido alvo, que se encontra numa forma estendida, e o DnaK ocorre através de interacções hidrofóbicas com as cadeias laterais e por pontes de hidrogénio com o “esqueleto” pep-

tídico. Ou seja, o Hsp70 reconhece aspectos estruturais comuns à maioria das cadeias nascentes. A ligação ao péptido é rápida e ocorre no estado ligado a ATP do DnaK. Neste estado, o “trinco” da hélice  $\alpha$  sobre a fenda do domínio de ligação ao péptido está numa conformação aberta (Figura 3B). A manutenção da ligação estável ao péptido capturado envolve o fecho do trinco, uma alteração conformacional obtida através da hidrólise do ATP ligado, a ADP. O ciclo do DnaK entre estes dois estados é regulado pelo *co-chaperone* DnaJ e pelo factor permutador de nucleótidos, GrpE. O terminal N do domínio J do *co-chaperone* DnaJ liga-se ao DnaK e acelera a hidrólise do ATP por este, facilitando a captura do péptido. O terminal C do DnaJ funciona como *chaperone* e está envolvido no reconhecimento de péptidos hidrofóbicos podendo recrutar DnaK para cadeias nascentes. Após a religação de ATP, o complexo DnaK-péptido dissocia-se, completando o ciclo. O enrolamento completo do polipéptido poderá requerer vários ciclos de ligação e libertação.

O sistema Hsp70 em eucariotas é semelhante ao anteriormente descrito para *E. coli*. Homólogos de DnaJ (HDJ1 e HDJ2, em mamíferos ou Ydj1 e Sis1, em *S. cerevisiae*) interagem com os polipéptidos substratos e estimulam a hidrólise de ATP pelos Hsp70 correspondentes (Hsc70 em mamíferos e Ssa1 a 4 em *S. cerevisiae*). Embora não se encontrem ortólogos do factor permutador de nucleótidos GrpE no citoplasma eucariota, a troca de nucleótidos é estimulada por *co-chaperones*, estruturalmente não relacionados, como BAG1 (*BCL2-associated athanogene 1*) e seus homólogos. Outros permutadores conhecidos são o HspBP1 (em mamíferos) e Fes1 (em *S. cerevisiae*).

#### C – Prefoldina/GimC

A prefoldina, também conhecida por complexo GimC (de genes envolvidos na biogénese dos microtúbulos), é um complexo hexamérico, com cerca de 90kDa composto por duas subunidades  $\alpha$  e quatro subunidades  $\beta$ , existente no citosol das arqueobactérias e dos seres eucariotas [3]. Foi, inicialmente, descrita como necessária para



**Figura 3** O sistema Hsp70. (A) Organização estrutural da *chaperone* DnaK, estruturas dos domínios ATPásico (esquerda) e de ligação ao péptido do DnaK (direita). As estruturas foram produzidas com o programa PDB viewer. (B) Ciclo de acção do sistema Hsp70 de *E. coli* (ver texto para detalhes). S, proteína substrato

o enrolamento e montagem da tubulina em *S. cerevisiae* e o seu homólogo em mamíferos como responsável por distribuir actina não-nativa ao *chaperone* TRiC *in vitro* [11]. A estrutura da prefoldina parece uma medusa com seis tentáculos em forma de hélice  $\alpha$  *coiled-coil* com cerca de 65Å de comprimento agarradas a um corpo em forma de barril composto por estruturas  $\beta$  (ver Figura 4B) [12]. As pontas dos tentáculos estão parcialmente desenroladas expondo resíduos hidrofóbicos para a ligação à proteína substrato não nativa. A prefoldina liga-se a cadeias nascentes durante a sua tradução e transfere-as, poste-

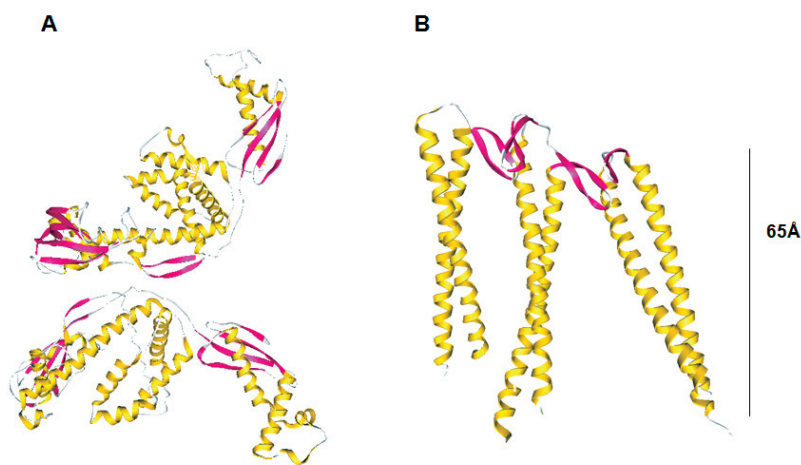
riormente, para a chaperonina TRiC. Cooperar com a chaperonina TRiC no enrolamento da actina e da tubulina, nos passos após tradução. A ligação e libertação do substrato pela prefoldina é independente de ATP.

#### D - Chaperoninas

As chaperoninas são uma família muito conservada de complexos cilíndricos de grandes dimensões em duplo anel, com cerca de 800kDa. Dispõem de um compartimento central interior onde uma cadeia polipeptídica pode ser enrolada [13]. Embora a ligação/libertação do substrato seja depen-

dente de ATP, o mecanismo de enrolamento é muito diferente do sistema Hsp70. A proteína não nativa é capturada através de contactos hidrofóbicos com as subunidades da chaperonina e uma vez no interior da cavidade é enrolada e libertada para o exterior, não sendo, portanto, possível a agregação com outras proteínas não-nativas. Estão classificadas em dois grupos com arquitectura semelhante, mas com sequências remotamente relacionadas [3,13]. As chaperoninas do grupo I, também conhecido por chaperoninas Hsp60, encontram-se nas eubactérias e nos organelos com origem endossimbiótica, mitocôndrias e cloroplastos e colaboram com os co-factores GroES (Hsp10). Ao grupo II pertencem as chaperoninas que são independentes de Hsp10 e que estão presentes nas arqueobactérias e no citosol das células eucarióticas.

**GRUPO I** – A chaperonina mais bem estudada é a GroEL (Hsp60) e o seu co-factor GroES (Hsp10) de *E. coli*, figura 5A. A GroEL é constituída por dois anéis heptaméricos com subunidades idênticas de 57kDa [14]. Cada subunidade possui três domínios distintos: o domínio equatorial, que contém o sítio de ligação ao ATP, ligado através de um domínio intermediário, tipo dobradiça, ao domínio apical. Este último faz a abertura do cilindro e expõe um número de resíduos hidrofóbicos na cavidade que liga o substrato. GroES é um anel homo-heptamérico de subunidades com cerca de 10kDa que funciona como o interruptor de GroEL controlada pela ATPase da própria GroEL. A GroEL funcional é assimétrica, uma vez que os dois anéis não se encontram no mesmo estado ligado a nucleótidos [14]. A ligação do substrato ao complexo GroEL-GroES ocorre na extremidade do anel de GroEL que não está ligado a GroES (Figura 5D). Quase simultaneamente ligam-se 7 moléculas de ATP às subunidades do anel de GroEL que acabou de receber o substrato e um complexo GroES, o que provoca o encapsulamento do substrato dentro da cavidade GroEL-GroES. As alterações conformacionais geradas levam à dissociação de GroES que se encontrava ligada ao anel oposto e a libertação de 7 moléculas de ADP. A ligação da molécula de GroES cau-



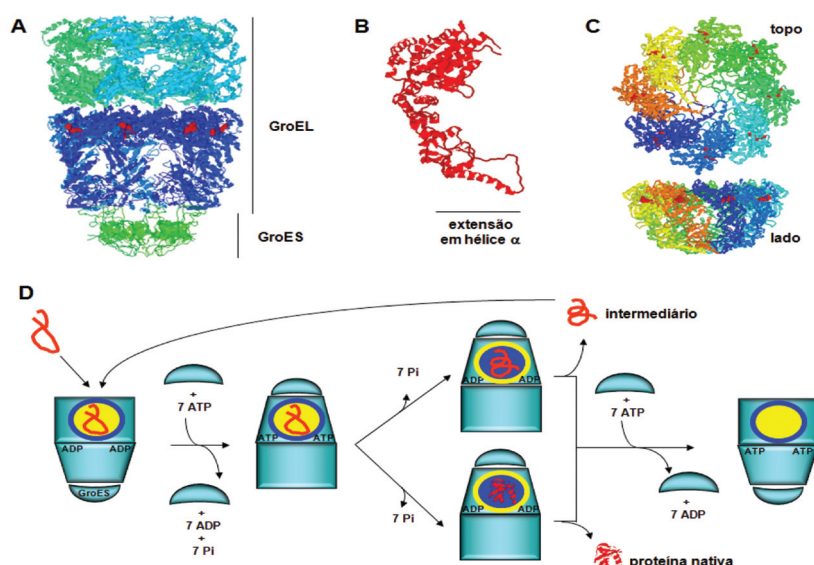
**Figura 4** Estruturas tri-dimensionais dos chaperones trigger factor (A) e da prefoldina (B) (As estruturas foram produzidas com o programa PDB viewer)

sa grandes rearranjos conformacionais da cavidade que se torna mais espaçosa e as propriedades da sua superfície interna passam de hidrofóbicas a hidrofílicas. Proteínas não-nativas até cerca de 60kDa podem ser encapsuladas e sofrerem enrolamento no interior da cavidade [3,13].

**GRUPO II**—As chaperoninas do grupo II também possuem estrutura em anel duplo, embora o número de subunidades por anel varie entre oito e nove [3,13]. Os complexos arqueobacterianos, conhecidos por termossomas, contêm duas ou três subunidades distintas por anel (Figura 5C). A chaperonina eucariota designada por TRiC/CCT (*TCP-1 ring complex/chaperonin-*

*containing TCP-1*) possui oito subunidades diferentes por anel, com cerca de 50 a 60kDa. As estruturas dos termossomas mostram que o arranjo das subunidades é idêntico ao encontrado na GroEL. O domínio de ligação ao ATP é conservado entre todas as chaperoninas e a divergência maior ocorre no domínio apical que possui uma extensão em hélice  $\alpha$  que se projecta para a abertura do anel (Figura 5B).

Como a diferença essencial entre as chaperoninas do grupo I e II é a ausência do factor GroES nas últimas, pensa-se que essas extensões funcionem como uma tampa funcionalmente equivalente a GroES [15].



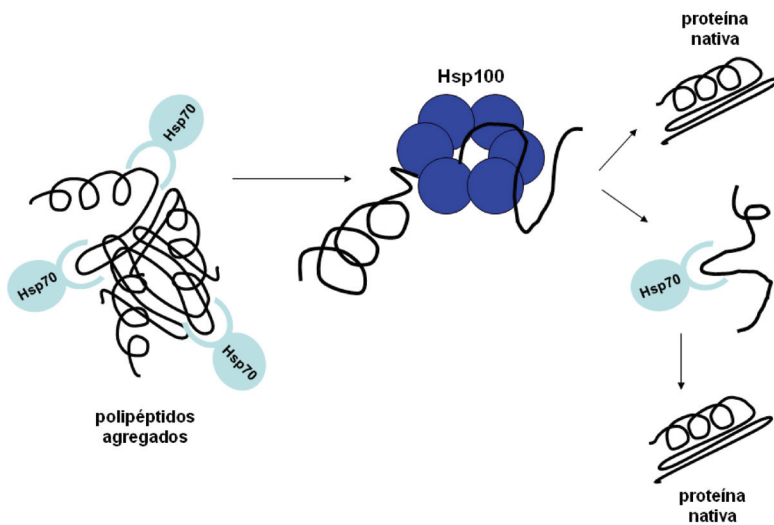
**Figura 5** As chaperoninas. (A) Estrutura tridimensional da GroEL/ES de *E. coli*. (B) Estrutura cristalina duma subunidade isolada do termossoma (TRiC) de *Thermoplasma acidophilum*. (C) Aspectos estruturais do anel  $\alpha$  do termossoma de *Thermococcus* sp.. Painel de cima, vista de topo. Painel de baixo, vista de lado. Moléculas de ADP, representadas a vermelho em space fill [39]. As estruturas foram produzidas com o programa RasMol. (C) Ciclo de acção da chaperonina GroEL/ES, ver texto para detalhes. Círculo amarelo, superfície apolar. Círculo azul, superfície polar

A forma como as chaperoninas do grupo II medeiam o enrolamento das proteínas está ainda muito pouco esclarecida (ver revisão de Spiess e colegas [16]). A actina e a tubulina foram os primeiros substratos descritos da TRiC, no entanto, actualmente, conhecem-se outros como a ciclina E e várias proteínas contendo domínios WD, ou seja domínios constituídos apenas por folhas  $\beta$  anti-paralelas [16].

## 2. Desagregação de proteínas

A exposição de células a certas condições de stresse produz agregação massiva de proteínas. Este é um problema comum especialmente nos organismos que não controlam a sua temperatura interna, como bactérias, fungos e plantas. A sobrevivência destes organismos depende da cooperação de um sistema bi-chaperónico, formado por Hsp70 e por Hsp100, que actua na solubilização das proteínas agregadas (desagregação) e na reacquirição da suas estruturas nativas (re-enrolamento) (ver revisão de Liberek e colegas [17]). Curiosamente, cada componente deste sistema, por si só, tem fraca capacidade (Hsp70) ou mesmo nenhuma capacidade de desagregação (Hsp100). Ortólogos de Hsp100 não foram encontrados em células animais, mas encontram-se na maioria das bactérias (ClpB), em *S. cerevisiae* (Hsp104) ou em plantas (Hsp101). O Hsp100 é um *chaperone* em forma de anel constituído por ATPases AAA+ (*ATPases associated with various cellular activities*). A actividade de desagregação de proteínas do Hsp100 está potencialmente relacionada com o desenrolamento que ocorre durante a translocação do polipéptido através do seu canal central [18]. Estudos recentes mostram que o *chaperone* Hsp70 é necessário para a fragmentação de agregados grandes em mais pequenos e que na ausência de Hsp100 os polipéptidos extraídos dos agregados não adquirem o enrolamento correcto, mas voltam a formar novos agregados [19]. Não só o tamanho do agregado é importante como parece ser importante o conteúdo em estruturas  $\beta$ . Observou-se que agregados contendo concentrações elevadas de estrutura  $\beta$  só são

processados na presença de Hsp100 [20]. Com a informação actual disponível, pensa-se que a acção do sistema Hsp70-Hsp100 na desagregação de proteínas ocorre da seguinte forma: primeiro, o *chaperone* Hsp70 desemaranha a cadeia polipeptídica do agregado; segundo, o polipéptido é transferido para o *chaperone* Hsp100 e translocado através do canal central para o seu interior, ocorrendo hidrólise de ATP. Terceiro, o polipéptido é libertado do Hsp100 e ou enrola espontaneamente ou sofre re-enrolamento pelo sistema Hsp70 (ver Figura 6).



**Figura 6** Esquema de actuação do sistema chaperónico Hsp100-Hsp70 na recuperação de polipéptidos agregados

### 3. Transdução de sinais

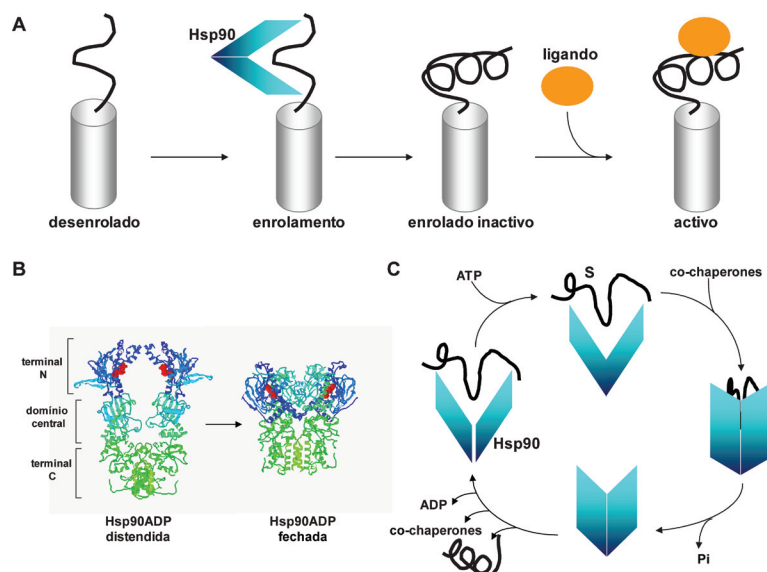
O *chaperone* Hsp90 presente nas células eucarióticas, desde a levedura de padeiro a organismos mais complexos como os mamíferos, está envolvido no enrolamento de um diverso leque de proteínas, tais como: factores de transcrição, proteínas envolvidas na transdução de sinais, como por exemplo receptores de hormonas esteróides e cinases reguladoras e outras proteínas que aparentemente não possuem aspectos estruturais ou funcionais semelhantes [21,22].

Ao contrário do que acontece com o Hsp70, o Hsp90 normalmente não actua no enrolamento de proteínas nascentes. O Hsp90 liga-se a proteínas cuja estrutura é próxima da nativa, actuando portanto a um nível do enrolamento final da proteína substrato (Figura 7A). O Hsp90 é um *chaperone* dependente de ATP e opera no cito-

plasma integrando uma maquinaria multichaperónica que inclui o *chaperone* Hsp70, peptidil-propil-isomerases e outros *co-chaperones* [9,23]. A actividade desta maquinaria é modulada por proteínas co-factores que interagem directamente e especificamente com o Hsp70 ou com o Hsp90 ou nalguns casos com ambos os *chaperones* (por exemplo, os *co-chaperones* da família com o domínio TPR-clamp, *tetratricopeptide repeat-clamp domain*). A proteína Hsp90 é homodimérica e cada subunidade possui três domínios bem definidos: i) um domínio de

ligação ao ATP no terminal N; ii) um domínio central que completa o sítio activo da ATPase e liga à proteína substrato; e iii) um domínio de dimerização no terminal C (Figura 7B). A resolução recente da estrutura da proteína HtpG, a Hsp90 de *E. coli*, veio revelar novos aspectos do mecanismo de acção desta classe de *chaperones*. Durante o ciclo ATPásico, os três domínios de Hsp90 passam de um estado aberto - livre de ATP - para um estado fechado - ligado a ATP (Figura 7B). Na ausência de ATP o dímero de Hsp90 encontra-se numa conformação "aberta", ou seja a posição dos dois monómeros é tal que origina uma grande abertura central "forrada" com elementos hidrofóbicos provenientes dos três domínios (estado apo) [24].

O estado apo é o estado mais provável para a ligação de proteínas substrato (Figura 7C). A estrutura sugere que durante o ciclo ATPásico ocorrem rearranjos radicais que conduzem à compactação do Hsp90. A ligação ao ATP induz a dimerização dos terminais N fechando a estrutura. A forma como a ligação do ATP interfere com o rearranjo da estrutura não está ainda clara, o que é óbvio é que, na totalidade, a hidrofobicidade da superfície da abertura central diminui. Pensa-se que então ocorrerá remodelação da proteína substrato. A hidrólise do ATP resulta num estado muito compacto contendo ADP e na libertação da proteína substrato e de *co-chaperones*.



**Figura 7** (A) Modelo de um dos tipos de acção do chaperone Hsp90 na vias de transdução de sinais. Os receptores de hormonas esteróides e cinases são enrolados pela maquinaria Hsp90 e após a ligação do ligando tornam-se activos. O cilindro representa a parte já estruturada da proteína substrato do Hsp90. (B) Estrutura do Hsp90 ligada a ADP (a vermelho) nas formas distendida e fechada. As estruturas foram produzidas com o programa PDB viewer. (C) Ciclo de acção do Hsp90. S, substrato

A dissociação do ADP leva ao estado apo (aberto) e pronto para um novo ciclo.

Várias são as questões ainda em aberto sobre o modo de acção do *chaperone* Hsp90. Por exemplo, a forma como as proteínas substrato se ligam aos vários domínios do Hsp90 ou de que forma os *co-chaperones* regulam o ciclo ATPásico, ou ainda como é regulada a especificidade do sistema Hsp90.

#### 4. Translocação de proteínas do citoplasma para organelos

A maquinaria Hsp70-Hsp90 para além de participar no enrolamento de vários polipéptidos desempenha um importante papel na distribuição de proteínas tanto para organelos como para a degradação pelo proteassoma (ver secção controlo de qualidade). As proteínas mitocondriais são na sua maioria sintetizadas no citoplasma numa forma precursora e importadas após a tradução para as mitocôndrias. A membrana externa das mitocôndrias possui um translocase designada por TOM e a membrana interna contém outro translocase conhecido por TIM. A Hsp90 e a Hsp70 de mamífero mantêm a solubilidade de polipéptidos precursores, enquanto no citoplasma, de algumas proteínas da membrana interna das mitocôndrias e medeiam a sua “entrega” ao translocase existente na membrana externa (TOM70) [9,25]. Na levedura de padeiro a Ydj1 associa-se transientemente com a membrana e dirige algumas proteínas para a mitocôndria e para o retículo endoplasmático [26]. Enquanto que, o *co-chaperone* Djp1 (da família das Hsp40) encontra-se especificamente envolvido na translocação de proteínas para os peroxissomas, mas não para o retículo ou para as mitocôndrias [27].

#### 5. Controlo de qualidade das proteínas

A função de uma proteína está associada à sua estrutura tridimensional. Uma vez perdida a estrutura, a proteína deixa de ser funcional. Isto pode acontecer devido a mutações ou devido à exposição das células a determinadas condições de stresse. As células desenvolveram mecanis-

mos de controlo de qualidade que reconhecem proteínas mal-enroladas. O controlo é realizado, por um lado, por *chaperones* que controlam o estado de enrolamento das proteínas e medeiam o seu re-enrolamento e, por outro lado, por proteases responsáveis pela degradação de proteínas mal-enroladas (Figura 1). As ATPases AAA+ são complexos proteicos em forma de anel que podem cooperar tanto com sistemas chaperónicos como com sistemas proteolíticos no controlo da qualidade das proteínas. Nas células eucarióticas o sistema intracelular de degradação de proteínas, dependente de ubiquitina/proteassoma (ver revisão em português de Ramos [28]), é responsável pela remoção de proteínas celulares tanto danificadas (devido a mau enrolamento, ou desnaturação) bem como de proteínas nativas de forma a regular a quantidade disponível da proteína funcional. O proteassoma 26S, o complexo proteolítico responsável pela degradação dos substratos possui na base da partícula reguladora um anel de ATPases AAA+. Por outro lado, a proteína Hsp100, também uma ATPase AAA+, actua independentemente de sistemas proteolíticos e em conjunto com o sistema chaperónico Hsp70 na solubilização e re-enrolamento de proteínas agregadas (ver secção desagregação de proteínas).

Nos mamíferos, a maquinaria Hsp70-Hsp90, para além da sua função como maquinaria de enrolamento de proteínas, está envolvida no controlo de qualidade das proteínas celulares. A proteína Bag1, um factor permutador de nucleótidos do Hsp70, para além de regular o ciclo ATPásico do *chaperone* Hsp70 possui um domínio *ubiquitin-like* que medeia a interacção com o proteassoma. A proteína CHIP (*carboxyl terminus of Hsp70-interacting protein*) está envolvida na ubiquitilação e degradação de alguns polipéptidos que são substratos da maquinaria Hsp70-Hsp90 uma vez que possui um domínio (TRP-clamp – *tetratricopeptide repeat*) que pode ser reconhecido tanto pelo Hsp70 como pelo Hsp90 e ao mesmo tempo possui actividade de ligase de ubiquitina (E3 do tipo U-Box, [28]). CHIP e BAG1 interagem entre si e pensa-se que recebam substratos não-nativos do sistema Hsp70-Hsp90, medeiam

a sua ubiquitilação e consequente degradação pelo proteassoma.

No retículo endoplasmático, o processo de maturação de uma proteína é acompanhado pela acção de vários enzimas e conduzido por um grande número de *chaperones*. O controlo de qualidade destas proteínas é conduzido por *chaperones* moleculares que dirigem proteínas aberrantes para o sistema ERAD (*ER-associated degradation*) (ver revisões de Brodsky [29] e de Anelli e Sitia [30]).

#### 6. Montagem de complexos proteicos

A importância dos *chaperones* na aquisição da estrutura tridimensional de uma proteína ou no desmantelamento de agregados encontra-se bem reconhecida, mas, normalmente, fica esquecida a importância dos *chaperones* na formação de complexos proteicos multiméricos. No entanto, as evidências são cada vez maiores de que a montagem de proteínas multiméricas é assistida por *chaperones* específicos [31].

O DNA é uma molécula muito longa que se encontra empacotada no núcleo de modo a ocupar pouco espaço. Os nucleossomas são estruturas constituídas por DNA enrolado (cerca de 146 pares de bases) num complexo de proteínas básicas designadas por histonas. A correcta deposição de histonas no DNA acabado de duplicar (replicar) é assistida por *chaperones* nucleares. Os nucleossomas são estruturas muito dinâmicas devido à acção do DNA. Assim, os *chaperones* nucleares estão divididos em dois grupos: a) *chaperones* envolvidos na montagem dependente de replicação; b) *chaperones* envolvidos na montagem independente de replicação. No primeiro grupo encontram-se o CAF-1 (*chromatin assembly factor 1*) e o NAP-1 (*chaperone nucleosome assembly factor 1*). Do segundo grupo constam *chaperones* como a HIRA (*histone-associated regulatory protein*), a nucleoplasmina, a proteína nuclear N1 e o TAF-1 (*template activating factor 1*).

O proteassoma 26S é uma protease multimérica dependente de ATP com cerca de 2000 kDa, que degrada pro-

teínas conjugadas covalentemente com ubiquitina. É constituído por dois complexos regulatórios 19S e por um complexo catalítico de com cerca de 700kDa, designado por proteassoma 20S [28]. A estrutura do proteassoma 20S de *S. cerevisiae* revelou a posição final das 28 subunidades que o constituem. Sete subunidades  $\alpha$  diferentes e sete subunidades  $\beta$  distintas organizam-se em quatro anéis empilhados, cada qual constituído por sete membros, numa estequiometria  $\alpha_7\beta_7\beta_7\alpha_7$  [32]. Embora a estrutura seja conhecida há mais de dez anos, a forma como as 28 subunidades se associam de modo a formar uma estrutura funcional ainda não é totalmente clara. O primeiro *chaperone* a ser descrito envolvido na montagem do proteassoma 20S foi o Ump1 [33]. Actualmente, sabe-se que são vários os *chaperones* que assistem a montagem do proteassoma 20S (Figura 8). O primeiro passo ocorre com a síntese das subunidades  $\alpha$ . Um heterodímero constituído pelos *chaperones* PAC1-PAC2 liga-se a algumas subunidades  $\alpha$  servindo como alicerce para a montagem de um anel  $\alpha$ . Um terceiro *chaperone* Pba3-Pba4 contribui também para organização dos anéis  $\alpha$ . As subunidades  $\beta_2$ ,  $\beta_3$  e  $\beta_4$  juntam-se ao anel formando o complexo 13S. As restantes subunidades  $\beta$ , bem como o *chaperone* Ump1, ligam-se formando o complexo 15S, com a libertação de Pba3-Pba4. O proteassoma 20S resulta da dimerização dos complexos 15S assistida pelo *chaperone* Ump1 que, após processamento autocatalítico das três subunidades  $\beta$  contendo actividade proteolítica, é degradado

pelo proteassoma, bem como os *chaperones* PAC1-PAC2 [33-36].

#### Perspectivas futuras

A compreensão do funcionamento e acção dos *chaperones* no enrolamento de proteínas apresenta um enorme potencial do ponto de vista biotecnológico pois poderá servir de base na optimização da produção de proteínas recombinantes (vejam-se algumas aplicações na referência 37). O incorrecto enrolamento de proteínas chave em determinados processos celulares, bem como a acumulação e consequente agregação de proteínas desenroladas estão associados a várias doenças como o cancro, doenças neurodegenerativas e senescência [38]. O melhor conhecimento de como a maquinaria de *chaperones* funciona, permitirá no futuro controlar a acção das proteínas tanto em condições normais como em condições de stress ou em caso de doença.

#### AGRADECIMENTOS

O trabalho no laboratório de PCR é financiado pela Fundação para a Ciência e Tecnologia, projecto POCI/BIA-PRO/58344/2004. ACM é financiada pela Fundação para a Ciência e Tecnologia, bolsa SFRH/BD/16951/2004/62qt. AJM é financiado por uma bolsa de doutoramento do programa "Genetics of Cellular Systems" da Forschungsgemeinschaft. Manifestamos o nosso agradecimento ao Professor Jürgen Dohmen pelas facilidades laboratoriais durante a escrita deste trabalho.

#### REFERÊNCIAS

- [1] C. B. Anfinsen, *Science* **181** (1973) 223-230.
- [2] C. M. Dobson, M. Karplus, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **9** (1999) 92-101.
- [3] F. U. Hartl, M. Hayer-Hartl, *Science* **295** (2002) 1852-1858.
- [4] P. Nissen, J. Hansen, N. Ban, P. B. Moore, T. A. Steitz, *Science* **289** (2000) 920-930.
- [5] T. Hesterkamp, S. Hauser, H. Lütcke, B. Bukau, *PNAS* **93** (1996) 4437-4441.
- [6] S. A. Teter, W. A. Houry, D. Ang, T. Trandler, D. Rockabrand, G. Fischer, P. Blum, C. Georgopoulos, F. U. Hartl, *Cell* **97** (1999) 755-765.
- [7] B. Wiedmann, H. Sakai, T. A. Davis, M. Wiedmann, *Nature* **370** (1994) 434-440.
- [8] C. Pfund, N. Lopez-Hoyo, T. Ziegelhoffer, B. A. Schilke, P. Lopez-Buesa, W. A. Walter, M. Wiedmann, E. A. Craig, *EMBO J.* **17** (1998) 3981-3989.
- [9] J. C. Young, V. R. Agashe, K. Siegers, F. U. Hartl, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **5** (2004) 781-791.
- [10] M. P. Mayer, B. Bukau, *Cell Mol. Life Sci.* **62** (2005) 670-684.
- [11] M. R. Leroux, M. Fändrich, D. Klunker, K. Siegers, A. N. Lupas, J. R. Brown, E. Schiebel, C. M. Dobson, F. U. Hartl, *EMBO J.* **18** (1999) 6730-6743.
- [12] R. Siegert, M. R. Leroux, C. Scheufler, F. U. Hartl, I. Moarefi, *Cell* **103** (2000) 621-632.
- [13] J. Frydman, *Annu. Rev. Biochem.* **70** (2001) 603-647.
- [14] Z. Xu, A. L. Horwich, P. B. Sigler, *Nature* **388** (1997) 741-750.
- [15] L. Ditzel, J. Löwe, D. Stock, K. O. Stetter, H. Huber, R. Huber, S. Steinbacher, *Cell* **93** (1998) 125-138.

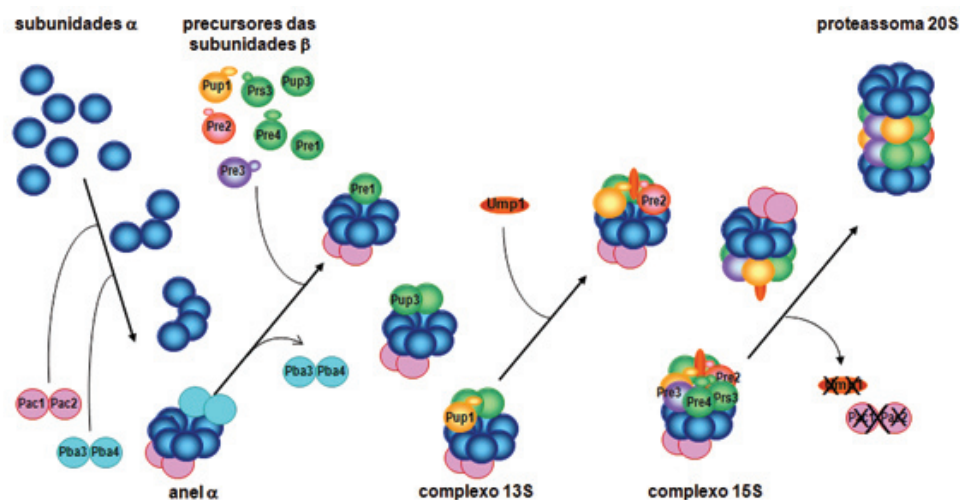


Figura 8 Montagem do proteassoma 20S assistida por *chaperones*

- [16] C. Spiess, A. S. Meyer, S. Reissmann, J. Frydman, *Trends Cell Biol.* **14** (2004) 598-604.
- [17] K. Liberek, A. Lewandowska, S. Zietkiewicz, *EMBO J.* **27** (2008) 328-335.
- [18] J. Weibezahn, P. Tessarz, C. Schlieker, R. Zahn, Z. Maglica, S. Lee, H. Zentgraf, E. U. Weber-Ban, D. A. Dougan, F. T. Tsai, A. Mogk, B. Bukau, *Cell* **119** (2004) 653-665.
- [19] S. Zietkiewicz, A. Lewandowska, P. Stocki, K. Liberek, *J. Biol. Chem.* **281** (2006) 7022-7029.
- [20] A. Lewandowska, M. Matuszewska, K. Liberek, *J. Mol. Biol.* **371** (2007) 800-811.
- [21] J. C. Young, I. Moarefi, F. U. Hartl, *J. Cell Biol.* **154** (2001) 267-273.
- [22] K. Richter, J. Buchner, *J. Cell Physiol.* **188** (2001) 281-290.
- [23] D. L. Riggs, M. B. Cox, J. Cheung-Flynn, V. Prapapanich, P. E. Carrigan, D. F. Smith, *Crit. Rev. Biochem. Mol. Biol.* **39** (2004) 279-295.
- [24] A. K. Shiau, S. F. Harris, D. R. Southworth, D. A. Agard, *Cell* **127** (2006) 329-340.
- [25] J. C. Young, N. J. Hoogenraad, F. U. Hartl, *Cell* **112** (2003) 41-50.
- [26] J. Becker, W. Walter, W. Yan, E.A. Craig, *Mol. Cell Biol.* **16** (1996) 4378-4386.
- [27] E.H. Hetteema, C.C. Ruigrok, M.G. Koerkamp, M. van den Berg, H.F. Tabak, B. Distel, I. Braakman, *J. Cell Biol.* **142** (1998) 421-434.
- [28] P. C. Ramos, *Química - Bol. Soc. Port. Qui.* **96** (2005) 57-63.
- [29] J.L. Brodsky, *Biochem. J.* **404** (2007) 353-363.
- [30] T. Anelli, R. Sitia, *EMBO J.* **27** (2008) 315-327.
- [31] R.J. Ellis, *Trends Biochem. Sci.* **31** (2006) 395-401.
- [32] M. Groll, L. Ditzel, J. Löwe, D. Stock, M. Bochtler, H. D. Bartunik, R. Huber, *Nature* **386** (1997) 463-471.
- [33] P. C. Ramos, J. Höckendorff, E. S. Johnson, A. Varshavsky, R. J. Dohmen, *Cell* **92** (1998) 489-499.
- [34] Y. Hirano, K. B. Hendil, H. Yashiroda, S. Iemura, R. Nagane, Y. Hioki, T. Natsume, K. Tanaka, S. Murata, *Nature* **437** (2005) 1381-1385.
- [35] Y. Hirano, H. Hayashi, S. Iemura, K. B. Hendil, S. Niwa, T. Kishimoto, M. Kasahara, T. Natsume, K. Tanaka, S. Murata, *Mol. Cell.* **24** (2006) 977-984.
- [36] A.R. Kusmierczyk, M.J. Kunjappu, M. Funakoshi, M. Hochstrasser, *Nat. Struct. Mol. Biol. Epub* (2008).
- [37] K. Nishihara, M. Kanemori, H. Yanagi, T. Yura, *Appl. Environm. Microbiol.* **66** (2000) 884-889.
- [38] C.M. Dobson, *Protein Pept. Lett.* **13** (2006) 219-227.
- [39] Y. Shomura, T. Yoshida, R. Iizuka, T. Maruyama, M. Yohda, K. Miki, *J. Mol. Biol.* **335** (2004) 1265-1278.

## CURIOSIDADE HISTÓRICA

### OS GÉNIOS QUÍMICOS DA LÂMPADA

Embora a paternidade da lâmpada de incandescência seja muitas vezes atribuída a Thomas Edison, na realidade Edison baseou o seu trabalho numa lâmpada descrita por um químico inglês num artigo publicado na *Scientific American*.

Edison trabalhou a invenção desse químico e apresentou a sua versão ligeiramente melhorada (essencialmente em termos da resistência do filamento) em Outubro de 1879, versão que patenteou em Janeiro de 1880 (patente 223 898 de 27 de Janeiro).

A lâmpada incandescente foi de facto inventada por Joseph Wilson Swan, a quem devemos igualmente o papel fotográfico de brometo de prata e trabalho pioneiro com nitrocelulose, um dos primeiros polímeros feitos, ou antes, modificados, pelo Homem.

Swan trabalhava na sua versão da lâmpada incandescente com filamento de carbono desde 1848 mas as bombas de vácuo existentes impediam a construção de uma lâmpada eficiente.

Hermann Sprengel, um químico que trabalhara na Alemanha no laboratório de Robert Wilhelm Bunsen (o mesmo dos bicos de Bunsen), mudou-se para Oxford em 1859.

Sprengel desenvolveu uma bomba de vácuo mais eficiente, a partir da versão inventada por Johann Heinrich Wilhelm Geissler, um mecânico e soprador de vidro que fabricava instrumentos científicos para vários investigadores da Universidade de Bona (que o agraciou com um doutoramento *Honoris Causa* em 1868).

Em 1868, Swan, que tivera conhecimento da bomba de Sprengel pelo trabalho de William Crookes, utilizou-a no aperfeiçoamento das suas lâmpadas. Em 1878, Swan relatou à *Newcastle Chemical Society* o sucesso da lâmpada que demonstrou em Fevereiro de 1879 numa conferência em Newcastle e patenteou no mesmo ano.

De qualquer forma, se não há dúvidas de que não foi Edison o inventor da lâmpada de incandescência nem sequer o primeiro a patentear a mesma, importa não esquecer que a iluminação eléctrica, das ruas principalmente, não se iniciou com Edison como

muitos igualmente pensam.

De facto, em 1802, muitos anos antes de Edison sequer ter nascido, outro químico inglês, Humphry Davy, descobrira o arco voltaico, também designado por arco de Davy, e inventara a lâmpada de Davy, apresentada à *Royal Society* a 9 de Novembro de 1815. As lâmpadas de arco voltaico foram utilizadas durante muitos anos na iluminação pública.

Nomeadamente, três anos antes de Edison nascer, em 1844, o físico francês Jean Foucault, que desenvolveu a invenção de Davy, conseguiu um arco eléctrico suficientemente brilhante para iluminar a Praça da Concórdia em Paris.

De igual forma foi um químico, o austríaco Carl Auer von Welsbach que se doutorou com Robert Bunsen, quem apresentou a primeira lâmpada comercial com filamento de metal.

PS

# Where Chemistry Meets Life Science

14 national  
chemical societies  
of EUChemSoc



are co-owners of  
*ChemBioChem*



Austria



Belgium



Czech Republic



France



Germany



Greece



Hungary



Italy



Netherlands



Poland



Portugal



Spain



Sweden

## Subscribe now!

For further information  
and to subscribe please  
send an E-mail to:

[cs-journals@wiley.com](mailto:cs-journals@wiley.com)

(North and South America)

[service@wiley-vch.de](mailto:service@wiley-vch.de)

(Germany/Austria/Switzerland)

[cs-journals@wiley.co.uk](mailto:cs-journals@wiley.co.uk)

(all other areas)



ISI Impact  
Factor (2006):  
**4.100**

2008. Volume 9.  
18 Issues.  
ISSN 1439-4227 print  
ISSN 1439-7633 online

**ChemBioChem is  
a leading journal for  
chemical biology and  
biological chemistry  
covering**

- bioinorganic and bioorganic chemistry
- biochemistry and biophysics
- molecular and structural biology
- biotechnology

### Chairmen of the Editorial Advisory Board:

Alan R. Fersht (UK)  
Jean-Marie Lehn (France)

**Editor:** Peter Göltz

**Deputy Editor:** Lobat Doostdar

**Managing Editor:** Lisa Abel

### **ChemBioChem offers:**

- FREE Table of Contents
- Early View – fully citable articles ahead of the printed version
- RSS feeds: Be automatically informed of new articles as soon as they are published online
- An attractive mixture of Communications, Full Papers, Reviews & Minireviews

Visit *ChemBioChem* online [www.chembiochem.org](http://www.chembiochem.org)



39200712



# LIBERTAÇÃO CONTROLADA DE IODETO DE COBRE ENCAPSULADO EM NANOTUBOS DE CARBONO<sup>#</sup>

PEDRO M.F.J. COSTA<sup>1,2,\*</sup>, DMITRI GOLBERG<sup>1</sup>

Apesar das potenciais implicações tecnológicas, o estudo da remoção de materiais alojados no interior de nanotubos tem sido relativamente negligenciado. Neste trabalho, demonstra-se que é possível remover substâncias encapsuladas em nanotubos de carbono tomando como exemplo o caso de iodeto de cobre sob a forma de nanogrãos cristalinos. O método aqui descrito emprega fluxos de corrente cuja acção proporciona a entrega de ínfimos volumes do halogeneto metálico *CuI* (na ordem  $<10 \times 10^{-19}$  g). Este procedimento, realizado no interior de um microscópio electrónico de transmissão (TEM), remove o material encapsulado de forma sequencial até ao total esvaziamento do tubo, sendo a velocidade de libertação controlada pelo operador. Paralelamente ao processo de esvaziamento, a resistência do sistema altera-se em função do conteúdo total de *CuI* no nanotubo. Para além deste método, baseado em correntes rápidas alternadas, outros foram explorados. Estes englobam processos de remoção induzida pela acção de calor, por irradiação de partículas e através de incrementos graduais de corrente. Todos estes métodos são realizados *in-situ* (i.e. no interior do microscópio) e resultaram em diferentes comportamentos de libertação do halogeneto.

## INTRODUÇÃO

O campo de investigação em nanotubos de carbono (CNTs) [1, 2] tem conhecido um interesse crescente na realização de aplicações tecnológicas tais como circuitos nanoelectrónicos e materiais compósitos. Assim, desde minúsculos cateteres médicos com biocompatibilidade acrescida [3] a fibras têxteis com propriedades mecânicas sem precedente [4], têm sido recentemente anunciados avanços consideráveis. Uma área em particular na qual os CNTs se revelam bastante promissores refere-se ao desenvolvimento de aparelhos de libertação controlada de substâncias, tais como drogas farmacêuticas, em quantidades ínfimas [5]. A entrega de quantidades diminutas de matéria encapsulada com precisão ao nível dos nanómetros requererá não só o controlo absoluto do processo de libertação mas também do preenchimento inicial dos nanotubos. Desta feita, o encapsulamento de substâncias em CNTs tem tido um enorme êxito. Entre os exemplos abundantes relatados na literatura encontram-se metais simples [6], ligas metálicas quaternárias [7], complexos organometálicos [8] e biomoléculas [9]. Não obstante os avanços consideráveis no preenchi-

mento de CNTs, o processo inverso (libertação) tem ficado algo esquecido. No caso específico de nanotubos de carbono de parede simples (SWNT), a remoção dos materiais tem provado ser um desafio bastante árduo por razões várias tais como interações “host-guest” do nanotubo (*host*) com as substâncias encapsuladas (*guest*) e acesso limitado de solventes ao interior do tubo. Assim, a generalidade dos estudos tem-se concentrado na variedade de parede múltipla (MWNT) a qual apresenta tubos interiores de maior diâmetro. Indubitavelmente, a técnica mais explorada tem sido expor os nanotubos preenchidos a solventes capazes de dissolver selectivamente o material encapsulado [10]. Este método, que não deverá afectar a malha de carbono é, aliás, a única forma de limpar SWNT [11, 12]. No entanto, e muito embora permita a eventual remoção completa do material dentro do tubo, esta metodologia não permite qualquer controlo sobre a extensão e velocidade da libertação. Esta é, portanto e somente, uma maneira simples de limpar os nanotubos de substâncias encapsuladas.

Um outro método alternativo tem sido desenvolvido, no qual se aproveitam as vantagens oferecidas pelos avanços técnicos no design de porta-amostras para microscópios electrónicos de transmissão (TEM). Usando porta-amostras especializados, os quais são capazes de estabelecer *in-situ* elevados fluxos de corrente entre eléctrodos, é hoje possível manipular

individualmente nanoestruturas unidimensionais (1D) e até alterar a sua morfologia [13, 14]. Adicionalmente, é possível analisar as propriedades eléctricas (*two or multi-probe measurements*) de nanotubos em paralelo com a observação estrutural e caracterização espectroscópica. Por outras palavras, são possíveis estudos estruturais de alta resolução, espectroscópicos (composição e ligação química) e de condutividade eléctrica, efectuados no mesmo equipamento e em simultâneo. O uso de corrente eléctrica como meio de libertar materiais do interior de nanotubos iniciou-se em 2004. No estudo pioneiro de Svensson *et al.*[15], foi demonstrado que CNTs preenchidos com Fe metálico podem ser esvaziados através de fluxos de corrente devido a electromigração (transporte de matéria por acção da corrente eléctrica). Este trabalho, efectuado no interior de um TEM, implicou a aplicação de diferenças de potencial de  $\sim 1$  V entre dois eléctrodos ligados apenas por um nanotubo suspenso, cheio de Fe. Estudos similares afirmam terem removido com sucesso vários outros metais [16, 17]. Deve ser referido que, para alguns destes trabalhos, os CNTs não se encontravam preenchidos na íntegra. Ademais, foram empregues condições relativamente árdias como elevadas densidades de corrente ou a presença de feixes de electrões de alta energia (TEM de 200-300 kV). Todavia, esta técnica pode, em princípio, abranger um número elevado de materiais para além de simples me-

<sup>1</sup> Nanoscale Materials Centre, National Institute for Materials Science, Ibaraki 305-0044, Japão

<sup>2</sup> CICECO, Campus Universitário de Santiago, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal

\* pedromfjcosta@ua.pt

<sup>#</sup> Adaptado do livro de abstracts da Conferência Internacional Carbon2008, Nagano-Japão, 13-18 de Julho de 2008. Comunicação premiada com o Japan Carbon Award for Young Researchers.

tais e porventura usar condições suaves, eventualmente biocompatíveis. Tal levaria à concretização efectiva de sistemas de libertação controlada de substâncias. Portanto, no que se refere ao uso de sistemas CNT será, em primeiro lugar, necessário desenvolver um método que possa remover a totalidade do material encapsulado nas condições mais suaves possíveis. Segundo, o conteúdo deve ser libertado com exactidão nanométrica no local desejado. Por último, o sistema deverá facultar o controlo da quantidade de amostra entregue (seuencialmente ou não) enquanto se monitoriza, em tempo real, o que sobeja no tubo.

Recentemente, o nosso grupo iniciou um estudo sistemático das propriedades eléctricas e mecânicas de nanoestruturas (quasi)-1D tais como fios [18], tubos [19, 20] e faixas [21], servindo-nos de diversos porta-amostras de TEM da empresa Nanofactory [22]. Em paralelo, demonstrámos que estes porta-amostras podem também ser usados para modificar a morfologia das nanoestruturas [14]. Estes estudos levaram-nos a ponderar se este, e porventura outros métodos *in-situ* TEM, poderiam ser adaptados para controlar o esvaziamento de nanotubos de carbono dos seus materiais encapsulados de natureza diferente dos metais simples. Neste trabalho, descrevemos como pulsos de corrente podem ser usados para descarregar nanogrãos de iodeto de cobre do interior de nanotubos de carbono. Esta técnica, com monitorização em tempo real de todo o processo, foi efectuada passo-a-passo. Tal permitiu a libertação controlada de quantidades tão diminutas quanto 10 ag de CuI (1 atograma =  $10^{-18}$  g). Adicionalmente, também investigámos métodos alternativos como sejam o aquecimento *in-situ* da amostra (transferência de energia térmica) e irradiação por partículas altamente energéticas (electrões com energia cinética de 300 keV).

## MÉTODOS EXPERIMENTAIS

Os nanotubos de carbono de parede múltipla foram sintetizados através de deposição química em fase de vapor (CVD) tal como descrito por Hampel *et al.* [23]. De seguida, no intuito de re-

mover as partículas de catalisador remanescentes da síntese e assegurar que as pontas dos nanotubos ficariam abertas, os produtos foram sujeitos a um tratamento de ácidos fortemente oxidantes [24]. Os nanotubos foram então misturados num almofariz com um excesso molar de CuI (Aldrich 99,99%) e colocados numa ampola de quartzo. Esta foi fechada em vácuo ( $10^{-3}$  Torr) e aquecida durante 24 h num forno a 873 K. Finamente, a ampola foi quebrada e o produto recolhido para análise. O rendimento estimado de preenchimento dos nanotubos foi de 60-70% (percentagem obtida pela inspecção visual por TEM de mais de 50 nanotubos).

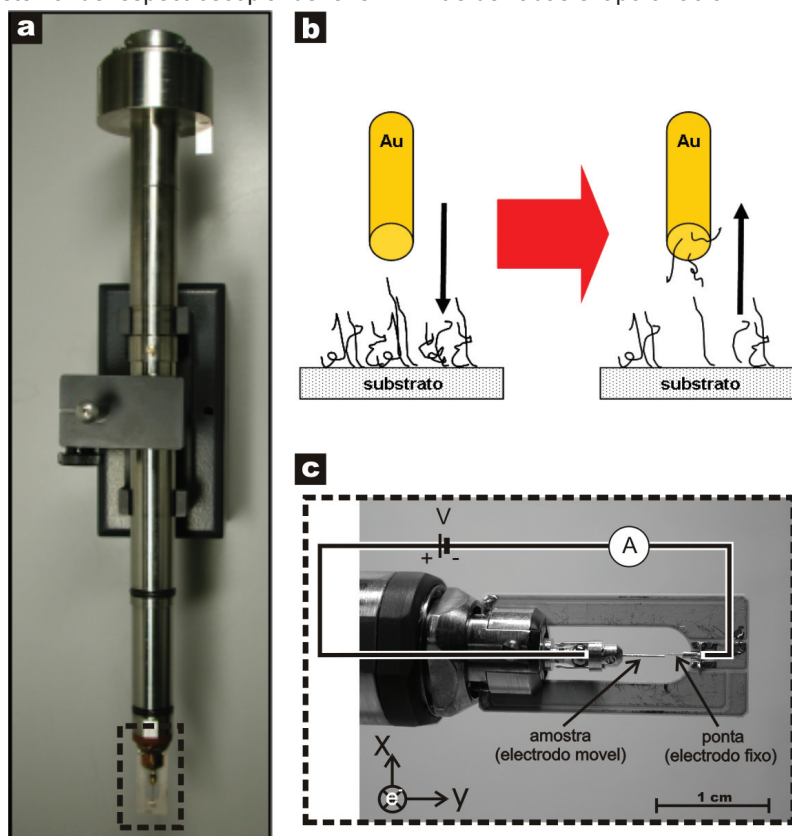
A caracterização estrutural, química e eléctrica dos nanotubos preenchidos foi efectuada num microscópio electrónico de transmissão (TEM) JEOL JEM-3100FEF operado a 300 kV e com uma resolução de ponto de 1,7 Å. Este instrumento, com uma fonte de emissão de campo, está equipado com um filtro de energia integrado na coluna (tipo Omega), um detector de Si(Li) com janela fina relativo ao sistema de espectroscopia de ener-

gia dispersiva de raios X (EDX), uma câmara CCD de varrimento lento com resolução  $1k \times 1k$ , um dispositivo anexo para efectuar TEM de varrimento (STEM) e que contém detectores anulares de campos claro e escuro, uma caixa Faraday para calibração da densidade de corrente e placas digitais de imagem Fuji para gravar padrões de difracção electrónica [25].

Todas as análises químicas e estruturais foram efectuadas num porta-amostras analítico de Be (baixo ruído) e com capacidade de rotação bi-axial (JEOL, intervalo de rotação:  $\pm 25^\circ$ ).

Para os estudos de temperatura *in-situ* utilizou-se um porta-amostras de rotação única (JEOL) com uma temperatura máxima de trabalho de 1073 K. As amostras (análise estrutural, química e de temperatura) foram preparadas recorrendo à dispersão do produto em etanol (grau *p.a.*) e por ultrasons.

Algumas gotas da suspensão obtida foram vertidas directamente para o filme de carbono que cobria a malha de Pt e deixadas evaporar ao ar.



**Figura 1** (a) Imagem do porta-amostras com capacidades STM (microscópio de varrimento de efeito de túnel) comercializado pela Nanofactory. (b) Esquema de montagem dos nanotubos no eléctrodo-amostra de Au. Alguns dos CNTs ficam agarrados e com orientação quasi-vertical. (c) Detalhe da área marcada em (a) com diagrama electrónico. Os dois eléctrodos de Au são visíveis bem como o tubo-piezo que controla o movimento do eléctrodo-amostra

As experiências com corrente obrigaram ao uso de um porta-amostras especializado e uma montagem de amostra diferente da acima descrita. As medições foram realizadas num porta-amostras de rotação uni-axial contendo um dispositivo de microscopia por efeito de túnel (STM) comercializado pela Nanofactory Instruments AB (Figura 1a).

Os CNTs preenchidos foram montados sem recorrer a processamentos químicos, adesivos ou solventes orgânicos. Uma pequena quantidade da amostra foi colocada numa lamela de vidro (substrato). De seguida, o fio de Au, que serviria como eléctrodo-amostra, foi posicionado de forma a tocar levemente a superfície da lamela como ilustrado na Figura 1b. Desta forma, e em consequência das forças de adesão, foi possível extrair várias estruturas. Destas, aquelas que se encontravam orientadas na direcção normal à superfície transversal do fio de Au foram posteriormente escolhidas para efectuar os contactos eléctricos.

precisão na ordem dos nanómetros. O segundo contacto eléctrico é efectuado numa única estrutura (Figura 2). Acompanhando todo o processo através da visualização microscópica, o nanotubo escolhido é cuidadosamente aproximado do eléctrodo-ponta até se verificar a passagem de corrente (estabilidade eléctrica) e a possibilidade de o dobrar em arco (estabilidade mecânica) [18]. Devido à flexibilidade destes nanotubos é possível flecti-los de forma elástica até elevados ângulos. As experiências de transporte de corrente foram executadas em dois modos: o primeiro, num regime de varrimento retrocesso-avanço rápido (~100 ms) aplicado a uma janela de potencial máxima de  $\pm 60$  mV; o segundo, através de incrementos lentos e unidireccionais de potencial até valores absolutos de 10V.

O processamento de imagens e subsequente análise envolveu o uso dos programas Digital Micrograph (Gatan Inc.) e Image J (National Institutes of Health, EUA).

ticas de ordem estrutural acrescida. A observação inicial dos sistemas CuI@MWNT indicou que os nanotubos estavam integralmente preenchidos (ver Figura 3a).

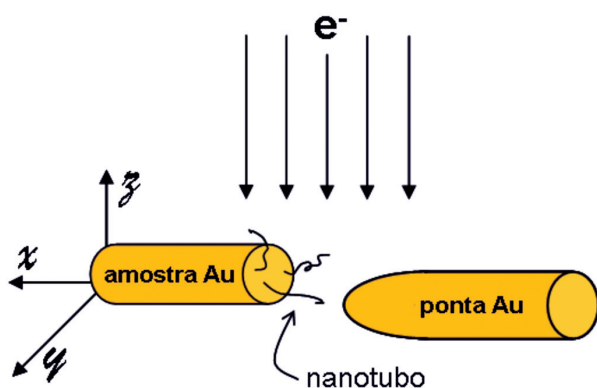
Todavia, o material encapsulado não era contínuo mas disposto numa sucessão de grãos de CuI – cfc (estrutura cúbica de faces centradas) de comprimentos variáveis. Estas cadeias de nanogrãos exibiam por vezes discontinuidades, originando vazios no preenchimento nomeadamente onde os nanotubos de carbono apresentavam defeitos extensos tais como “cotovelos” (ver Figura 3b).

A relação estrutural dos nanogrãos-CNT revelou-se irregular demonstrada pelas frequentes rotações de malha dos grãos de CuI.

A análise química por EDX comprovou o preenchimento de CuI com estequiometria 1:1 (ver Figura 3c). Para além do material encapsulado, uma proporção significativa de CuI@MWNT estava decorada externamente com uma fina camada amorfa. Com espessura máxima de 3 nm, esta foi assumida como resultado do excesso molar de CuI usado durante o preenchimento dos CNT (a amostra não foi purificada depois da síntese a fim de evitar o desalojamento do material encapsulado).

A investigação das características corrente-potencial (I-V) dos sistemas CuI@MWNT revelou comportamentos diversos. Geralmente, as curvas iniciais assemelhavam-se a contactos do tipo Schottky “back-to-back” (não linear e simétricos) mas rapidamente evoluíam para outras de relação linear, afins a contactos do tipo óhmico.

Esta diferenciação foi assumida como uma consequência da presença das camadas finas de CuI que cobriam os nanotubos. De facto, esta cobertura de CuI amorfo, o qual é um semiconductor (mínimo  $E_{g, RT} = 2,95$  eV [26]), altera o contacto, passando a existir efectivamente uma relação Au-CuI-CNT. O resultado imediato será o aumento do potencial de contacto podendo originar assim uma barreira de Schottky pronunciada. Por outro lado, na ausência deste filme amorfo, i.e. uma



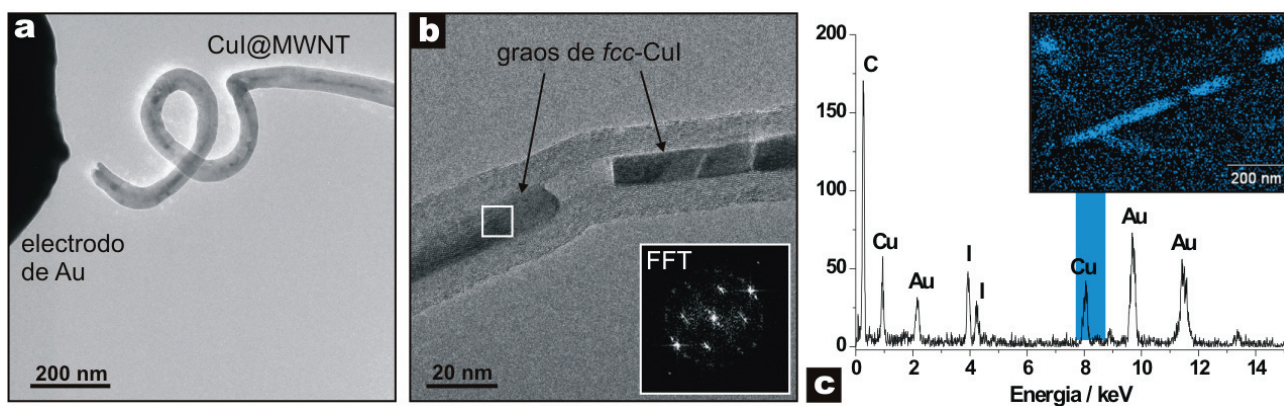
**Figura 2** Ilustração do processo de aproximação de um nanotubo ao eléctrodo-ponta (fixo). Apenas uma estrutura é contactada após o controle de posição do eléctrodo-amostra (móvel). “e<sup>-</sup>” representa o feixe de electrões do microscópio electrónico

O eléctrodo-amostra foi colocado opostamente a um fio de Au análogo (ambos com diâmetros de 250  $\mu$ m, ver Figuras 1c e 2). Este último, estacionário, permite alterar o potencial de polarização (eléctrodo-ponta). O eléctrodo-amostra é fixado num suporte de Au contendo seis extensões (“pernas”) que se encaixam numa esfera de safira. Esta encontra-se por sua vez colada a um tubo piezoeléctrico o qual possibilitará a manipulação tri-axial (x, y, z) das nanoestruturas com

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise de TEM dos nanotubos preenchidos mostrou que estes apresentavam morfologias diversas do tipo parafuso ou de cilindros quase-perfeitos, um fenómeno característico de CNT sintetizados pela técnica de CVD (pirólise) [1].

A malha de carbono era maioritariamente do tipo turbostrático embora amiúde intercalada de secções grafi-

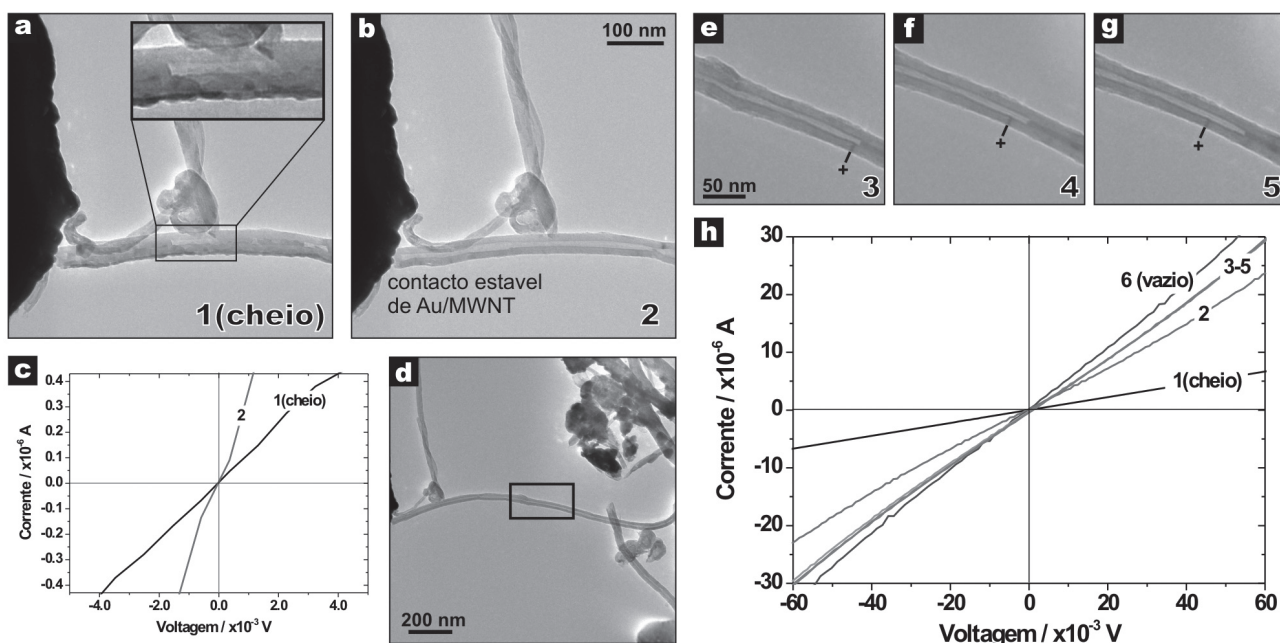


**Figura 3** (a) Nanotubo de carbono, em forma de parafuso, integralmente preenchido com CuI (CuI@MWNT). À esquerda (perfil escuro) encontra-se o eléctrodo-ponta de Au. (b) Secção arqueada (cotovelo) exibindo uma descontinuidade de preenchimento. Imagem interior: transformada rápida de Fourier (FFT) da área assinalada no CuI@MWNT ilustrando claramente a ordem cristalina do halogeneto de metal. (c) Espectro EDX de um CuI@MWNT. Os picos de Au advêm dos electrões retro-dispersos pelos eléctrodos. A banda de energia marcada a azul (Cu  $K_{\alpha}$  ~7,5-8,5 keV) foi usada para construir o mapa químico da imagem interior

junção directa de Au-CNT, resultaria num contacto óhmico uma vez que os CNT tem um carácter metálico.

fície de secção transversal da ponta do CNT estava inicialmente limpa (curva 1 da Figura 4c). Em paralelo à

do MWNT ( $\ell = 2.62 \mu\text{m}$ , Figura 4d). A libertação sequencial do halogeneto pode ser seguida em pormenor nas



**Figura 4** Remoção completa do conteúdo de um CuI@MWNT. (a) Imagem inicial do nanotubo preenchido firmemente ligado ao eléctrodo-ponta. Imagem interior: presença de descontinuidades de preenchimento e de uma camada externa amorfa. (b) O mesmo nanotubo depois da primeira aquisição I-V. O preenchimento de CuI foi parcialmente removido junto com a totalidade do filme fino superficial. (c) Curvas I-V correspondentes a (a) e (b), demonstrando a larga diferença de declives. Os números das curvas correspondem aos do canto inferior direito das respectivas imagens para mais fácil leitura. (d) Panorama geral do CuI@MWNT analisado. O rectângulo refere-se à área em relevo de (e) a (g). (e-g) Detalhe da libertação gradual e controlada de CuI. A cruz marca um ponto de referência no nanotubo. (h) Conjunto de curvas I-V que ilustram as sucessivas mudanças de características eléctricas ocorridas durante o processo de libertação

Seguindo este raciocínio, a evolução das curvas I-V do tipo não-linear a linear é explicada pela remoção da camada amorfa externa de CuI, levando ao aparecimento de um contacto Au-CNT. Em concordância com esta hipótese observou-se que os varrimentos rápidos eram extremamente eficazes na limpeza da superfície externa dos nanotubos tal como poderá ser confirmado pelas Figuras 4a e 4b. O sistema apresentado na Figura 4 exibiu a particularidade de auferir um contacto óhmico eléctrodo-CuI@MWNT desde a primeira aquisição I-V, o que necessariamente implica que a super-

remoção do filme amorfo, o I-V inicial libertou uma porção apreciável de CuI encapsulado. A segunda aquisição I-V (curva 2 da Figura 4c) revelou uma relação linear de declive acrescido bem como libertação adicional de CuI. De uma forma geral, as aquisições I-V consecutivas tiveram um efeito notável em duas vertentes (as quais se encontram relacionadas como veremos adiante): em primeiro lugar, o aumento gradual do declive da curva I-V e, seguidamente, o esvaziar progressivo do nanotubo. O controlo e fiabilidade deste processo foram de tal ordem que permitiu remover todo o CuI do interior

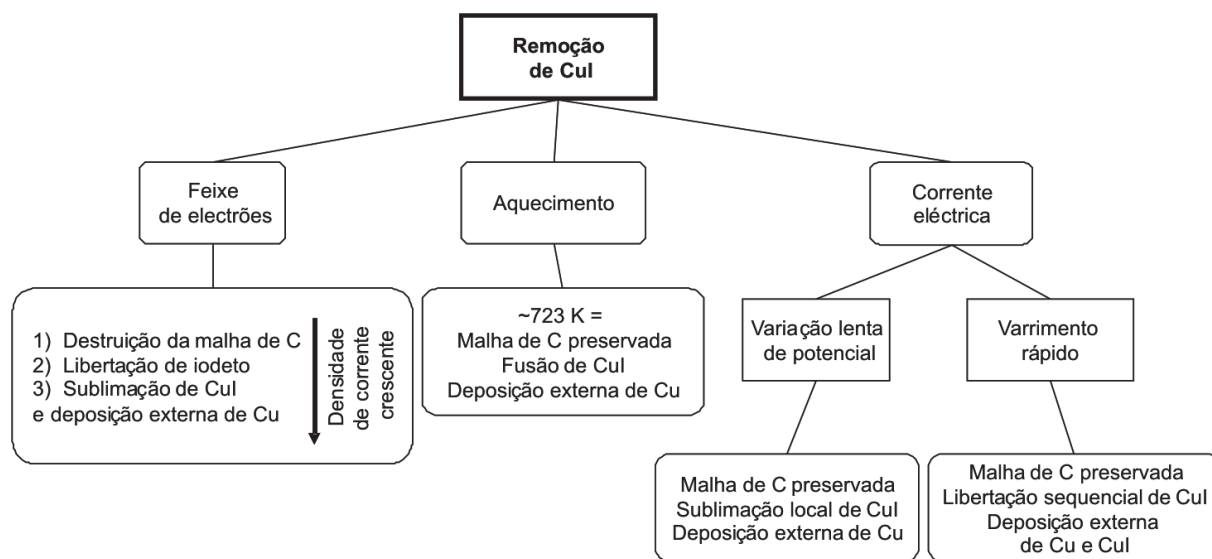
imagens das Figura 4e a 4g. Embora o volume de CuI removido a cada passo não fosse constante, a média estimada foi de aproximadamente  $7,5(\pm 3,5)$  ag. A razão por detrás das discrepâncias observadas encontra-se na configuração dos preenchimentos. Tal como referido, este é constituído por cadeias de nanogrãos com diferentes orientações e comprimentos. Um ponto adicional a notar foi o decréscimo de resistência do sistema, o qual é consistente e unidireccional ao longo de todo o processo de libertação (Figura 4h). A resistência inicial do sistema

( $R_{1,cheio} = 8,99 \text{ k}\Omega$ ) pode ser calculada através da relação óhmica,  $R = dV/dI$ . De referir que este valor inclui não só a resistência eléctrica da estrutura mas também aquelas inerentes aos contactos Au-CNT. No entanto, sendo estes fisicamente estáveis durante todo o processo de libertação (não foram observados quaisquer deslizamentos) e dada a ausência de alterações da malha de carbono, podemos assumir que as mudanças são devidas apenas ao CuI@MWNT. Isto implica que a redução gradual da resistência eléctrica do sistema Au/CuI@MWNT/Au pode ser atribuída à libertação sequencial do material encapsulado.

#### Métodos alternativos de libertação *in-situ* de Cul

O factor-chave no processo de libertação acima descrito foi o rápido e variável fluxo de corrente eléctrica proveniente da aplicação de uma janela de varrimento de diferenças de potencial entre os dois eléctrodos de Au. Adicionalmente à estabilidade da estrutura do nanotubo, foi observado que apenas volumes de Cul removidos a cada passo sofriam mudanças de carácter físico e químico, ou seja, o restante preenchimento não era afectado. Na verdade, os varrimentos rápidos podem ser considerados como pulsos de corrente alternada. Um tempo de

ao máximo absoluto de 10 V. Curiosamente, a libertação de Cul demonstrou um comportamento radicalmente diferente do processo de varrimento rápido. Desta feita, em vez de o esvaziamento se processar por estágios, uma vez atingido um potencial de  $\sim 7,5 \text{ V}$  observou-se a evaporação instantânea do conteúdo de Cul com subsequente deposição de partículas quasi-esféricas na superfície externa do CNT. Com diâmetros variando de 7 a 18 nm, algumas destas apresentavam faces bem visíveis, características de sólidos cristalinos. A análise química por EDX revelou uma composição de Cu puro. Incrementos adicionais de potencial levaram à contracção gra-



**Figura 5** Diagrama ilustrativo dos diferentes métodos *in-situ* TEM usados para remover o conteúdo (Cul) do interior de CNT: irradiação por partículas de altamente energéticas (i.e. feixe de electrões com  $E_e = 300 \text{ keV}$ ), aquecimento (transferência de energia térmica) e corrente eléctrica (variação lenta/rápida de potencial). Os efeitos nos CuI@MWNT variaram consideravelmente consoante o método empregado

Esta hipótese foi adicionalmente validada através de aquisições I-V feitas depois de o nanotubo ter sido completamente esvaziado. Desta feita, a resistência  $R_{6,vazio} = 1,8 \text{ k}\Omega$  permaneceu constante (erro-padrão:  $0,3 \text{ k}\Omega$ ).

Em suma, este procedimento permite a remoção controlada de materiais encapsulados em nanotubos de carbono e simultaneamente sugere uma eficiente metodologia de controlo da condutância de sistemas complexos de CNT.

Com este trabalho alguns dos requisitos principais para sistemas de libertação de substâncias à nanoescala foram alcançados (esvaziamento passo-a-passo e completo, entrega de volumes mínimos e monitorização de todo o processo em tempo real).

aquisição de 100 ms, aplicado a uma janela de potencial de  $\pm 60 \text{ mV}$ , traduz-se numa velocidade de varrimento de  $1,2 \text{ V/s}$  para cada I-V. Como foram necessárias numerosas e consecutivas aquisições I-V a fim de esvaziar um CuI@MWNT por completo, cada um destes varrimentos pode ser interpretado como um ciclo AC (pulso). Sendo que o processo é inteiramente controlado pelo operador, as frequências de aquisição variaram entre  $0,05 - 0,5 \text{ Hz}$  (onde  $1 \text{ Hz} = 1 \text{ varrimento/s}$ ). Vários métodos *in-situ* alternativos ao varrimento rápido foram explorados a fim de estudar em maior detalhe o mecanismo de libertação do Cul (Figura 5). Prossequindo com o uso de corrente eléctrica, foram efectuadas experiências nas quais o potencial foi lentamente variado ( $\sim 0,02 \text{ V/s}$ ) num sentido apenas (avanço ou retrocesso) até

dual das partículas e, eventualmente, ao seu desaparecimento. Neste ponto, o nanotubo apresentava-se limpo e sem grandes alterações da malha de carbono. No entanto, a elevação do potencial para valores de  $8-9 \text{ V}$  levava invariavelmente à ruptura dos CNT. Considerando as interpretações mecanísticas na literatura, que aludem a electromigração como responsável pelo esvaziamento de nanotubos preenchidos (quando se utiliza corrente eléctrica), as amostras foram sujeitas a aquecimento prolongado no interior do TEM. Para tal, foi necessário um porta-amostras específico capaz de elevar a temperatura na área de estudo até  $923 \text{ K}$ . Os nanotubos foram esvaziados a aproximadamente  $723 \text{ K}$ , o que representa uma temperatura inferior à da fusão de Cul monolítico (m.p. =  $873 \text{ K}$ ). Esta diferença pode

dever-se a efeitos de tamanho [27]. Infelizmente, a extrema velocidade do processo de libertação levou a que a câmara de vídeo (30 imagens/s) fosse incapaz de filmar quaisquer pormenores da fusão e esvaziamento. O material libertado foi encontrado próximo dos nanotubos sob a forma de partículas cristalinas de Cu metálico. De referir também, que em semelhança ao método de corrente eléctrica, a estrutura dos CNT foi preservada. A opção de irradiar os CuI@MWNT usando o feixe de electrões ( $e^-$ ) do TEM, foi notoriamente mais destrutiva que os métodos precedentes. A incidência de partículas com energia cinética de 300 keV levou à decomposição do CuI mesmo antes de o remover do interior do nanotubo. Adicionalmente, também a estrutura de malha dos CNT foi destruída. O procedimento seguido incluiu três etapas distintas, com crescente densidade de carga (electrões/nm<sup>2</sup>).

Numa primeira fase, foi usado um feixe moderadamente convergido (densidade média), durante a qual se observou a destruição parcial da malha de carbono. Este é um fenómeno facilmente explicável que se relaciona com o conhecido efeito “knock-on” (ejeção de átomos de carbono) [28]. Não foram observadas remoção ou modificações na malha e composição de CuI. Ao elevar o grau de convergência do feixe de electrões ( $e^-$ ), acresceu a desordem estrutural dos nanotubos bem como do seu conteúdo. Recorrendo à análise química por EDX foi possível verificar uma alteração na razão de Cu:I, consequência da ejeção selectiva de I. A fase final da irradiação ocorreu quando o feixe foi completamente convergido, obtendo-se assim uma sonda de electrões altamente energética. Tal conduziu à decomposição do halogeneto remanescente e a obliteração das camadas de carbono. De novo, obtiveram-se partículas de Cu quasi-esféricas depositadas nos destroços do nanotubo. Não são, até ao presente, absolutamente claros quais os mecanismos que governam os diferentes comportamentos observados. Para além de efeitos como a electromigração, o aquecimento de Joule e/ou transferência de calor, outros factores devem ser considerados como sejam a acção do feixe de electrões. Embora os primeiros sejam pro-

vavelmente dominantes na remoção do CuI, é possível que o feixe contribua significativamente sobretudo como gerador dos depósitos de cobre metálico (implicando obrigatoriamente a decomposição prévia do CuI).

### CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Partindo do preenchimento com um halogeneto de metal de transição, foi demonstrado que é possível libertar controladamente o conteúdo de nanotubos de carbono. Diversos métodos *in-situ* TEM foram explorados, fazendo uso de vários motores de libertação (corrente eléctrica, aquecimento e irradiação por electrões). No processo de corrente eléctrica de varrimento rápido, ocorreram alterações progressivas às propriedades dos CuI@MWNT, nomeadamente da resistência eléctrica, as quais se encontram directamente relacionadas com a taxa de preenchimento dos nanotubos. Espera-se que o exposto possa auxiliar no desenvolvimento de futuros aparelhos de entrega de substâncias. Naturalmente, a transposição do presente trabalho para aplicações concretas requererá a manipulação das estruturas no exterior de TEMs. Por conseguinte, o próximo passo será testar estes sistemas *ex-situ*. Uma vez que a condutividade eléctrica é directamente proporcional ao conteúdo do nanotubo, a evolução do processo poderá ser seguida sem requerer a visualização constante do sistema. Futuramente, a integração final dar-se-á (potencialmente) através da montagem dos nanotubos em pontas de AFM condutoras. Estas, quando utilizadas numa vertente nanomedicinal, possibilitam a libertação intracelular e “célula-a-célula” de drogas farmacêuticas, tal como demonstrado recentemente [29].

### AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Rui F. Silva a leitura do manuscrito. Adicionalmente, à Dr. Silke Hampel, do IFW Dresden, por providenciar a amostra. Este trabalho foi financiado pelo projecto Nanotubos do *National Institute for Materials Science*, Japão.

### REFERÊNCIAS

- [1] P.M.F.J. Costa, M.L.H. Green, *Química Bol. Soc. Port. Quím.* **88** (2003) 57-64.
- [2] P.M.F.J. Costa, J. Sloan, M.L.H. Green,

*Ciência e Tecnologia dos Materiais* **18** (2006) 3-7.

- [3] S. Koyama, et al., *Small* **2** (2006) 1406-1411.
- [4] K. Koziol, et al., *Science* **318** (2007) 1892-1895.
- [5] R.P. Feazell, N. Nakayama-Ratchford, H. Dai, S.J. Lippard, *J. Am. Chem. Soc.* **129** (2007) 8438-8439.
- [6] P. Ajayan, S. Iijima, *Nature* **361** (1993) 333-334.
- [7] P.M.F.J. Costa, J. Sloan, J.L. Hutchison, M.L.H. Green, *Chemical Communications* (2003) 2276-2277.
- [8] D.A. Britz, A.N. Khlobystov, *Chemical Society Reviews* **35** (2006) 637-659.
- [9] J.J. Davis, et al., *Inorganica Chimica Acta* **272** (1998) 261-266.
- [10] J. Sloan, M. Green, “Synthesis and characterization of materials incorporated within carbon nanotubes”, in K. Kadish (ed.), *Fullerenes: Chemistry, Physics and Technology*, London, John Wiley & Sons, Inc. (2000) 795-838.
- [11] G. Brown et al., *Applied Physics A - Materials Science and Processing* **76** (2003) 457-462.
- [12] N. Thamavarankup et al., *Chemical Communications* (2004) 1686-1687.
- [13] X. Wei, Q. Chen, Y. Liu, L. Peng, *Nanotechnology* **18** (2007) 185503.
- [14] P.M.F.J. Costa, D. Golberg, M. Mitome, Y. Bando, *Applied Physics Letters* **91** (2007) 223108-3.
- [15] K. Svensson, H. Olin, E. Olsson, *Physical Review Letters* **93** (2004) 145901-4.
- [16] D. Golberg, et al., *Advanced Materials* **19** (2007) 1937-1942.
- [17] L.X. Dong, X.Y. Tao, L. Zhang, X.B. Zhang, B.J. Nelson, *Nano Letters* **7** (2006) 58-63.
- [18] P.M.F.J. Costa, D. Golberg, G. Shen, M. Mitome, Y. Bando, *Journal of Materials Science* **43** (2008) 1460-1470.
- [19] P.M.F.J. Costa, D. Golberg, M. Mitome, Y. Bando, *Applied Physics A: Materials Science and Processing* **90** (2008) 225-229.
- [20] D. Golberg, et al., *Nano Letters* **7** (2007) 2146-2151.
- [21] P.M.F.J. Costa, D. Golberg, *Resultados não publicados*.
- [22] Nanofactory. [cited 9/8/2007]; Available from: <http://www.nanofactory.com/>.
- [23] S. Hampel, et al., *Carbon* **44** (2006) 2316-2322.
- [24] S.C. Tsang, Y.K. Chen, P.J.F. Harris, M.L.H. Green, *Nature* **372** (1994) 159-162.
- [25] Y. Bando, et al., *Journal of Japanese Applied Physics* **40** (2001) L1193-L1196.
- [26] D.R. Lide, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 85th ed., Boca Raton: CRC Press, Inc. (2004).
- [27] S. Kodambaka, J. Tersoff, M.C. Reuter, F.M. Ross, *Science* **316** (2007) 729-732.
- [28] L. Reimer, *Transmission Electron Microscopy*, 2nd ed., Optical Series, Springer-Verlag, Berlin (1989).
- [29] X. Chen, A. Kis, A. Zettl, C.R. Bertozzi, *Proceedings of the National Academy of Sciences (EUA)* **104** (2007) 8218-8222.

# UMA REVISÃO DA BIBLIOGRAFIA SOBRE O ENSINO DA QUÍMICA VERDE

DOMINIQUE A. COSTA<sup>a</sup>, M. GABRIELA T. C. RIBEIRO<sup>b</sup> \* E ADÉLIO A. S. C. MACHADO<sup>a</sup>

Apresenta-se uma revisão crítica da bibliografia existente na literatura sobre o ensino da Química Verde, cuja análise e discussão permitiu formular algumas sugestões quanto a pistas que podem levar ao desenvolvimento de actividades pedagógicas úteis para o seu progresso, nomeadamente quanto a experiências laboratoriais.

No âmbito da formulação de um plano de doutoramento dirigido à prática experimental da Química Verde (QV) no Ensino Secundário, a ser desenvolvido por um de nós (DAC), procurou aferir-se a extensão actual da penetração daquela nova atitude de realização da química no ensino desta ciência. Neste contexto, realizou-se uma análise sistemática da bibliografia sobre o ensino da QV, com ponto de partida nos artigos publicados no *Journal of Chemical Education* (JCEd) sobre o assunto. Esta nota tem por fim apresentar sumariamente os resultados da pesquisa bibliográfica realizada e algumas conclusões genéricas que esta evidenciou, esperando-se que possa ser útil para os colegas que estiverem interessados em fazer evoluir o ensino da química para a QV.

**Pesquisa bibliográfica.** Para avaliar a importância já atingida pela QV no ensino da química realizou-se uma pesquisa no índice do JCEd [1], feita a partir do termo “*green chemistry*”, sucessivamente nos títulos dos artigos e nas palavras-chave, que identificou 77 artigos (até Dezembro de 2007). Os artigos foram sujeitos a uma análise prévia, verificando-se que 19 não envolvem explicitamente QV (a maioria destes dizem respeito a Química Ambiental). Os 58 restantes [2-59] foram classificados em nove tipos traduzidos pelas seguintes siglas: D, Divulgação da QV; E, Ensino (propostas de ensino, cursos, actividades, etc., sem abordar detalhadamente experiências laboratoriais); ED, Experiência de demonstração; LA, Experiência de laboratório em Química Analítica; LG, *Idem*

em Química Geral; LI, *Idem* em Química Inorgânica; LO, *Idem* em Química Orgânica; M, Métricas; R, Recensão crítica de livro. Esta tarefa conduziu a mais alguns artigos sobre o ensino da QV, na referida revista e noutras [60-66], que foram englobados na análise. Por fim, completou-se a pesquisa bibliográfica com a identificação dos artigos de índole pedagógica publicados na revista *Green Chemistry* da *Royal Chemical Society* (Londres) [67-74].

Estes dois grupos de artigos foram classificados como os anteriores. Nas Tabela 1 e Figura 1 apresentam-se, respectivamente, os resultados da classificação (número total de artigos em cada uma das nove classes), e o número total de artigos publicados em cada ano. A Tabela 1 e as referências bibliográficas permitirão aos interessados no ensino da QV orientar-se quanto à escolha de informação, em especial, trabalhos práticos, que já estão disponíveis na literatura.

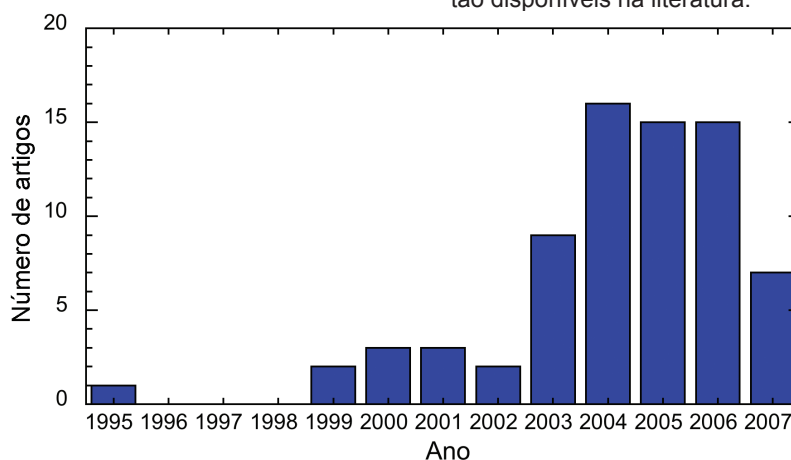


Figura 1 Distribuição dos artigos de índole educacional sobre QV por ano de publicação

Tabela 1 Distribuição dos artigos\* por classes e anos\*\*

	D Divulgação da QV	E Ensino Da QV	ED Exp. de demonstração	LA Exp. Lab Q. Anal.	LG Exp. Lab. Q. Geral	LI Exp. Lab Q. Inorg	LO Exp. Lab. Q. Org	M Métricas	R Recensão de livro
1995	2								
1999	3					4	4		
2000	5					60	6		
2001	7						61, 67		
2002							8, 9		
2003		68	12	10	69		62, 63, 64, 68	62	11, 13
2004	14, 70	18, 20, 21, 65	71			15, 16	17, 19, 21, 22, 23, 24, 65, 66, 72		
2005		30, 35, 73, 74			25	32	26, 27, 28, 29, 31, 33, 34, 36, 37	27, 35, 73	
2006	47	45, 48			45		39, 40, 41, 42, 43, 44, 46, 49, 50, 51, 52	45	38
2007	54, 55	55					53, 56, 57, 58	59	
Total	9	12	2	1	3	5	43	6	3

\*) Referências: em tipo normal, do JCEd; em *italico*, da revista *Green Chemistry*; em **negrito**, de outras revistas.

\*\*) Para nomes completos das siglas, ver o texto.

<sup>a</sup> Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, R. Campo Alegre, 687, 4169-007 Porto

<sup>b</sup> REQUIMTE, Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, R. Campo Alegre, 687, 4169-007 Porto

\* gribeiro@fc.up.pt

**Emergência e alcance da QV.** A distribuição anual dos artigos na Figura 1 mostra que o primeiro artigo sobre o ensino da QV foi publicado no JCEd em 1995 [2]. Tratava-se de um artigo de divulgação, que apresenta um curso introdutório à QV; segundo o que o conteúdo programático e a bibliografia de suporte sugerem, só 9 lições (sobre catálise e biocatálise) das 25 do curso seriam dirigidas à QV – as outras contemplavam tópicos clássicos de química ambiental, poluição e sua remediação, embora procurando seguir uma estratégia global de QV (o artigo foi publicado antes da divulgação dos Doze Princípios da QV [75]). Os autores mencionam designações alternativas para QV, por exemplo “química ambientalmente benigna”, mas afirmam que QV é “a mais largamente usada” – esta afirmação refere-se possivelmente a uso coloquial, já que na literatura científica e educacional o termo era então ainda raramente empregue [76].

Só quatro anos depois, em 1999, surgem no JCEd mais dois artigos sobre QV. Um deles [3] refere o uso dos conteúdos das propostas premiadas anualmente no concurso anual da *Presidential Green Chemistry Challenge* [77], lançada pelo presidente Clinton em 1995, para uma actividade docente destinada a propagandear a QV em cursos de Química Ambiental e Química Industrial.<sup>1</sup> O outro artigo [4] analisa a complementaridade da Química à Microescala relativamente à QV e mostra de modo qualitativo, sem quantificar com métricas, como alguns aspectos da prática da primeira cumprem objectivos da segunda, por exemplo: produção de menos resíduos (e menores gastos de reagentes), uso de reagentes e/ou solventes alternativos menos perigosos, utilização de novas vias de síntese, menores tempos de reacção, etc.

Nos anos seguintes, até 2002, foram publicados na literatura 2-4 artigos por ano, verificando-se depois uma subida rápida para 15-16 artigos por ano a partir de 2004. No entanto, interessante, em 2007 o número decresceu para 7. Este facto pode ser casual ou significar um certo “grau de descrença” na QV resultante da aplicação imprópria do termo, já que

não é infrequente a “reivindicação de verdura” ser ilegítima: por vezes, os químicos melhoram a verdura de uma reacção numa área, mas esquecem as outras, piorando a verdura global (a ref. [78] apresenta um exemplo recente que elucida esta afirmação).

Quanto ao alcance da bibliografia da QV, avaliado pela temática dos 73 artigos analisados, a Tabela 1 mostra que cerca de um terço se refere à divulgação e ensino (24 artigos nas classes D, E e R), apenas 6 contemplam a apresentação e cálculo de métricas (classe M), e mais de dois terços (54 artigos) propõem a realização de demonstrações e experiências de QV (classes ED, LA, LG, LI e LO). Quanto a estes últimos, a grande maioria (43 artigos) refere-se a trabalhos práticos de Química Orgânica – evidenciando o menor interesse que tem havido na preparação de experiências de demonstração (2 artigos) e de laboratórios de Química Geral (3 artigos) e Química Inorgânica (5 artigos) dirigidas à QV.

**Discussão.** A análise realizada permitiu definir algumas linhas de actuação que devem ser seguidas para se desenvolver o ensino da QV, nomeadamente por via experimental.

Um primeiro facto a realçar é o maior esforço que deve ser feito quanto à preparação de experiências de demonstração e de trabalhos práticos adequados para laboratórios de nível introdutório – são necessárias mais experiências que possibilitem primeiros contactos com a QV, para a instilar mais largamente, e de raiz, na mente dos jovens estudantes.

Outro aspecto que merece menção é a total ausência de experiências dirigidas à Química Industrial. A química é o único ramo da ciência que tem uma indústria específica associada a ele, a Indústria Química, cuja actividade é fulcral quando se consideram os seus efeitos no ambiente e a necessidade de incrementar a verdura da química – por isso, até para estimular o interesse pelas actividades industriais da química, devem implementar-se experiências que mostrem as possibilidades de esverdeamento dos processos industriais. A maioria dos artigos sobre

experiências de laboratório tem vindo a ser dirigida à Química Orgânica – o que não é de espantar, porque como mostram os valores do Factor E [79] é neste ramo da química que o problema da baixa produtividade atómica [80] mais intensamente se põe. De qualquer modo, esta situação põe aos químicos inorgânicos o desafio de proporcionarem mais experiências de QV.

Por outro lado, com excepção de seis artigos [27,35,45,59,62,73] que incluem o cálculo de métricas de massa para aferir a qualidade de verdura química alcançada nas experiências propostas ou em reacções, esta é avaliada, frequentemente, de forma algo vaga e subjectiva, pelo cumprimento de alguns dos Doze Princípios da QV – e mesmo nos artigos em que há o cuidado de explicar como foi conseguido um ganho de verdura, a justificação é vulgarmente feita por afirmações qualitativas simplistas como as exemplificadas no Quadro 1 (por ex. [4,10,15,24,41,52,55,58]). Os Doze Princípios são dirigidos aos químicos académicos de laboratório e têm-se mostrado muito úteis para propagandear a QV e ajudar a perseguir os objectivos desta, mas a química é uma actividade muito diversificada e complexa e, por isso, a variedade de situações encontradas no mundo real a requererem modificações para aumentar a sua benignidade não é “governada” apenas por eles. Em particular, os Doze Princípios não contemplam especificamente, e não permitem aferir, a prática industrial da química, que desde sempre, por razões de segurança, procurou processos o mais benignos possível (Alfredo Nobel foi talvez o primeiro químico verde! [81]); nomeadamente, o desenvolvimento dos processos químicos exige um conjunto de ferramentas variadas que permitam avaliações comparativas de alternativas de processos e operações, por métricas quantitativas diversas, referentes às diferentes características com relevância ambiental das substâncias e reacções químicas [82]. Esta situação sugere que se deve dar mais atenção à incorporação de métricas quantitativas de verdura nas experiências laboratoriais de QV, embora isso nem sempre seja fácil. A propósito da importância das métricas, aconselha-



-se a leitura de um artigo recente que mostra os progressos que o cálculo do Factor E trouxe para esverdear a Química Industrial [83].

ciclo-de-vida, quando se adoptam novas propostas de reacções de síntese, operações de purificação complementares, etc., dirigidas à QV – por exem-

Quadro 1

**Justificações mais vulgares da verdura alcançada nas novas experiências propostas**

**Redução de...**

Quantidades e custos de reagentes estequiométricos e auxiliares (reagentes protectores, solventes, agentes de separação, etc.)  
Quantidades de resíduos produzidos e correspondentes custos de deposição  
Tempos de reacção  
Toxicidade (reagentes, solventes, etc.)  
Energia dispendida (reacções à temperatura ambiente)  
Solventes orgânicos (por realização da reacção em meio aquoso ou sem solvente)

**Aumento de...**

Segurança (eliminação de solventes tóxicos e inflamáveis e preferência pela água)  
Facilidade do isolamento e acabamento do produto ("work-up")  
Economia atómica

**Outros**

Catalisador de origem renovável e biodegradável  
Prevenção de resíduos em vez de tratamento

Embora muitos dos artigos realcem a postura de criatividade e inovação que as experiências de QV permitem instilar na mente dos alunos, o que seguramente é de enaltecer, as experiências são invariavelmente apresentadas com atitude académica, tradicionalmente reducionista. A ideia básica da QV é tão apelativa do ponto de vista da Sustentabilidade, que "foi agarrada" com vigor pela comunidade química académica com consciência ambiental, mas a sua prática exige uma mudança de atitude por parte dos químicos, que acompanhe a da sociedade quanto ao Desenvolvimento Sustentável – requer a adopção de um paradigma de pensamento holístico, que considere como unidade básica de raciocínio o ciclo-de-vida do composto e do processo usado para o seu fabrico, considerando o seu alcance global, mesmo quando se considera apenas um detalhe do ciclo (só com esta nova atitude se impede o aparecimento das falsas "reivindicações de verdura" referidas atrás).

**CONCLUSÃO**

A discussão anterior sugere que é preciso fazer sentir aos estudantes a necessidade de, tanto quanto possível, aferir quantitativamente os ganhos (ou perdas) de verdura global, em todo o

plo, uma reacção química intencionalmente verde pode facilmente "ser estragada" por um acabamento de produto ("work-up") sem verdura. Em face da já referida complexidade da química, sente-se que há lugar para a procura de novos trabalhos práticos para o ensino da QV, não só para o ensino universitário, mas também para o ensino secundário, que contemplem conjuntamente a implementação de novos procedimentos laboratoriais verdes e a avaliação dos seus ganhos de verdura por cálculo de métricas, quer estequiométricas (produtividade do uso dos átomos) [80], quer ambientais, mediante a inclusão de ferramentas de aferição relativa adequada – nomeadamente, um desafio concreto a atacar será incluir métricas adequadas de verdura ambiental nas actividades de laboratório.

**NOTA**

<sup>1</sup> De referir que as propostas concorrentes à *Presidential Green Chemistry Challenge* devem contemplar situações com verdura comprovada por demonstração cabal ou prática no mundo real (nos EUA, nos cinco anos anteriores ao de atribuição).

**REFERÊNCIAS**

[1] *J. Chem. Ed.*, em <http://jchemed.med>

[wisc.edu/Journal/Search/search.html](http://wisc.edu/Journal/Search/search.html) (acedido em 2007.11.26)

- [2] T.C. Collins, "Introduction Green Chemistry in Teaching and Research", *J. Chem. Ed.* **72** (1995) 965-6.
- [3] M. C. Cann, "Bringing State-of-the Art, Applied, Novel, Green Chemistry to the Classroom by Employing the Presidential Green Chemistry Challenge Awards", *J. Chem. Ed.* **76** (1999) 1639-41.
- [4] M. M. Singh, Z. Szafran e R.M. Pike, "Microscale Chemistry and Green Chemistry: Complementary Pedagogies", *J. Chem. Ed.* **76** (1999) 1684-6.
- [5] D. L. Hjeresen, D. L. Schutt e J. M. Boese, "Green Chemistry and Education", *J. Chem. Ed.* **77** (2000) 1543-7.
- [6] S. M. Reed e J. E. Hutchison, "Green Chemistry in the Organic Teaching Laboratory: An Environmental Benign Synthesis of Adipic Acid", *J. Chem. Ed.* **77** (2000) 1627-9.
- [7] M. M. Kirchhoff, "Topics in Green Chemistry", *J. Chem. Ed.* **78** (2001) 1577.
- [8] N. Pohl, A. Clague e K. Schwarz, "Chiral Compounds and Green Chemistry in Undergraduate Organic Laboratories: Reduction of a Ketone by Sodium Borohydride and Baker's Yeast", *J. Chem. Ed.* **79** (2002) 727-8.
- [9] B. A. Harper, J. C. Rainwater, K. Birdwhistell e D. A. Knight, "Aqueous-Phase Palladium-Catalysed Coupling – A Green Chemistry Laboratory Experiment", *J. Chem. Ed.* **79** (2002) 729-31.
- [10] D. L. Giokas, E. K. Paleologos e M. I. Karayannis, "Micele-Mediated Extraction of Heavy Metals from Environmental Samples – An Environmental Green Chemistry Laboratory Experiment", *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 61-4.
- [11] W. Canover, "Introduction to Green Chemistry" (M. A. Ryan e M. Tinnensand (eds.), ACS, 2002), *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 268.
- [12] W. E. Wellman e M. E. Noble, "Greening the Blue Bottle", *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 537-40.
- [13] A. M. Rosan, "Green Chemistry: An Introductory Text" (M. Lancaster, RSC, 2002), *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 1141-2.
- [14] E. S. Uffelman, "News from Online: Green Chemistry", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 172-6.
- [15] E. S. Uffelman, J. R. Doherty, C. Schulze, A. L. Burke, K. R. Bonnema, T. T. Watson e D. W. Lee III, "Microscale Syntheses, Reactions, and 1H NMR Spectroscopic Investigations of Square Planar Macrocyclic Tetraamido-N Cu(III)

- Complexes Relevant to Green Chemistry", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 182-5.
- [16] E. S. Uffelman, J. R. Doherty, C. Schulze, A. L. Burke, K. R. Bonnema, T. T. Watson e D. W. Lee III, "Microscale Syntheses, Reactions, and <sup>1</sup>H NMR Spectroscopic Investigations of Square Planar Macrocyclic Tetraamido-N Co(III) Complexes Relevant to Green Chemistry", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 325-9.
- [17] A. J. Seen, "Alkene Isomerization Using a Solid Acid as Activator and Support for a Homogenous Catalyst", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 383-4.
- [18] Y. Song, Y. Wang e Z. Geng, "Some Exercises Reflecting Green Chemistry Concepts", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 691-2.
- [19] F. Fringuelli, O. Piermatti e F. Pizzo, "One-Pot Synthesis of 7-Hydroxy-3-carboxycoumarin in Water", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 874-6.
- [20] M. C. Cann e T. A. Dickneider, "Infusing the Chemistry Curriculum with Green Chemistry Using Real-World Examples, Web Modules, and Atom Economy in Organic Chemistry Courses", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 977-80.
- [21] T. E. Goodwin, "An Asymptotic Approach to the Development of a Green Organic Chemistry Laboratory", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 1187-90.
- [22] D. R. Palleros, "Solvent-Free Synthesis of Chalcones", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 1345-7.
- [23] S. H. Leung e S. A. Angel, "Solvent-Free Wittig Reaction: A Green Organic Chemistry Laboratory Experiment", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 1492-3.
- [24] J. J. Esteb, K. M. Gligorich, S. A. O'Reilly e J. M. Richter, "Solvent Free Conversion of  $\alpha$ -Naphthaldehyde to 1-Naphthoic Acid and 1-Naphthalenemethanol: Application of the Cannizzaro Reaction", *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 1794-5.
- [25] S. M. McCarthy e S. W. Gordon-Wylie, "A Greener Approach for Measuring Colligative Properties", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 116-9.
- [26] J. M. Daley e R. G. Landolt, "A Substitute for "Bromine in Carbon Tetrachloride", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 120-1.
- [27] L. C. McKenzie, L. M. Huffman e J. E. Hutchison, "The Evolution of a Green Chemistry Laboratory Experiment: Greener Brominations of Stilbene", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 306-10.
- [28] G. W. V. Cave e C. L. Raston, "Green Chemistry Laboratory: Benign Synthesis of 4,6-Diphenyl(2,2')bipyridine via Sequential Solventless Aldol and Michael Addition Reactions", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 468-9.
- [29] T. M. Jones-Wilson e E. A. Burtch, "A Green Starting Material for Electrophilic Aromatic Substitution for the Undergraduate Organic Laboratory", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 616-7.
- [30] J. A. Haack, J. E. Hutchison, M. M. Kirchoff e I. J. Levy, "Going Green: Lecture Assignments and Lab Experiences for the College Curriculum", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 974-6.
- [31] L. L. White e K. W. Kittredge, "A Microwave Assisted Reduction of Cyclohexanone Using Solid-State Supported Sodium Borohydride", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1055-6.
- [32] A. Romero, G. Hernández e M. F. Suárez, "Photocatalytic Oxidation of Sulfurous Acid in an Aqueous Medium", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1234-6.
- [33] G. D. Bennett, "A Green Polymerization of Aspartic Acid for the Undergraduate Organic Laboratory", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1380-1.
- [34] T. Friscic, T. D. Hamilton, G. P. Papaefstathiou e L. R. MacGillivray, "A Template-Controlled Solid-State Reaction for the Organic Chemistry Laboratory", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1679-81.
- [35] S. D. Van Arnum, "An Approach Towards Teaching Green Chemistry Fundamentals", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1689-92.
- [36] J. J. Esteb, J. N. Hohman, D. E. Schlamminger e A. M. Wilson, "A Solvent Free Baeyer-Villiger Lactonization for the Undergraduate Organic Laboratory: Synthesis of  $\gamma$ -t-Butyl- $\epsilon$ -caprolactone", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1837-8.
- [37] G. A. Sereda, "Comparative Methylation of 1,8-Dihydroxy-9,10-antraquinone: Chemoselectivity in the Organic Chemistry Laboratory", *J. Chem. Ed.* **82** (2005) 1839-40.
- [38] R. Pagni, "Environmental Chemistry", 3<sup>a</sup> ed (C. Baird e M. Cann, Freeman, 2005), *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 217.
- [39] R. L. Crumbie, "Environmentally Responsible Redox Chemistry: An Example of Convenient Oxidation Methodology without Chromium Waste", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 268-9.
- [40] M. R. Dintzner, P. R. Wucka e T. W. Lyons, "Microwave-Assisted Synthesis of a Natural Insecticide on Basic Montmorillonite K10 Clay", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 270-2.
- [41] I. Montes, D. Sanabria, M. Garcia, J. Castro e J. Fajardo, "A Greener Approach to Aspirin Synthesis Using Microwave Irradiation", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 628-31.
- [42] R. Musiol, B. Tyman-Szram e J. Polanski, "Microwave-Assisted Heterocyclic Chemistry for the Undergraduate Organic Laboratory", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 632-3.
- [43] K. M. Touchette, "Reductive Amination: A Remarkable Experiment for the Organic Laboratory", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 929-30.
- [44] K. K. W. Mak, J. Siu, Y. M. Lai e P. Chan, "Mannich reactions in Room Temperature Ionic Liquids (RTILs): An Advanced Undergraduate Project of Green Chemistry and Structural Elucidation", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 943-6.
- [45] K. L. Cacciatore e H. Seviran, "Teaching Lab Report Writing through Inquiry: A Green Chemistry Stoichiometry Experiment for General Chemistry", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1039-41.
- [46] S. Ravia, D. Gamenara, V. Scjhapiro, A. Bellomo, J. Adum, G. Seoane e D. Gonzalez, "Enantioselective Reduction by Crude Plant Parts: Reduction of Benzofuran-2-yl Methyl Ketone with Carrot (*Daucus carota*) Bits", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1049-51.
- [47] J. W. Moore, "Faculty Responsibilities", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1111.
- [48] B. Braun, R. Charney, A. Clarens, J. Farrugia, C. Kitchens, C. Lisowski, D. Nainstat e A. O'Neil, "Completing Our Education: Green Chemistry in the Curriculum", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1126-9.
- [49] J. Bennett, K. Meldi e C. Kimmell II, *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1221-4.
- [50] J. Pereira e C. A. M. Afonso, "Asymmetric Aldol Reaction Induced by Chiral Auxiliary", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1333-5.
- [51] A. J. F. N. Sobral, "Synthesis of meso-Diethyl-2,2'-dipyrrromethane in Water", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1665-6.
- [52] G. D. Bennett, "A Green Enantioselective Aldol Condensation for the Undergraduate Organic Laboratory", *J. Chem. Ed.* **83** (2006) 1871-2.
- [53] K. C. Nguyen e H. Weizman, "Greening Wittig Reactions: Solvent-Free Synthesis of Ethyl *trans*-Cinnamate and *trans*-3-(9-Anthryl)-2-Propenoic Acid Ethyl Ester", *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 119-21.
- [54] E. S. Uffelman, "News from Online: Renewable Resources", *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 220-2.
- [55] A. E. Marteel-Parrish, "Toward the Greening of Our Minds: A New Special

- Topics Course”, *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 245-7.
- [56] R. D. Crouch, A. Richardson, J. L. Howard, R. L. Harker e K. H. Barker, “The Aldol Addition and Condensation: The Effect of Conditions on Reaction Pathway”, *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 475-6.
- [57] G. A. Sereda e V. B. Rajpara, “A Green Alternative to Aluminum Chloride Alkylation of Xylene”, *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 692-3.
- [58] R. Gandhari, P. P. Maddukuri e T. K. Vinod, “Oxidation of Aromatic Aldehydes Using Oxone”, *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 852-4.
- [59] J. Andraos e M. Sayed, “On the Use of “Green” Metrics in the Undergraduate Organic Chemistry Lecture and Lab to Assess the Mass Efficiency of Organic Reactions”, *J. Chem. Ed.* **84** (2007) 1004-10.
- [60] Z. Zafran, M. M. Singh e R. M. Pike, “The Philosophy of Green Chemistry as Applied to the Microscale Inorganic Chemistry Laboratory”, *Educación Química* **11** (2000) 172-3.
- [61] M. Hulce e D. W. Maks, “Organic-Solvent-Free Phase-Transfer Oxidation of Alcohols Using Hydrogen Peroxide”, *J. Chem. Ed.* **78** (2001) 66-7.
- [62] L. M. O. C. Merat e R. A. S. San Gil, “Inserção do Conceito de Economia Atômica no Programa de uma Disciplina de Química Orgânica Experimental”, *Química Nova* **26** (2003) 779-81.
- [63] J. J. Esteb e M. B. Stockton, “A Solvent-Free Claisen Condensation Reaction for the Organic Laboratory”, *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 1446-7.
- [64] J. J. Esteb, M. W. Schelle e A. M. Wilson, “A Solvent-Free Oxidation of Alcohols in an Organic Laboratory”, *J. Chem. Ed.* **80** (2003) 907-8.
- [65] E. S. Santos, I. C. G. Garcia e E. F. L. Gomez, “Caring for the Environment While Teaching Organic Chemistry”, *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 232-8.
- [66] L. C. McKenzie, L. M. Huffman, K. E. Parent, J. E. Hutchison e J. E. Thompson, “Patterning Self-Assembled Monolayers on Gold”, *J. Chem. Ed.* **81** (2004) 545-8.
- [67] M. G. Warner, G. L. Succaw e J. E. Hutchison, “Solventless Syntheses of Mesotetraphenylporphyrin: New Experiments for a Greener Organic Chemistry Laboratory Curriculum”, *Green Chem.* **3** (2001) 267-70.
- [68] S. Tavener, J. Hardy, N. Hart e A. Goddard, “Teaching Green Chemistry: From Lemons to Lemonade Bottles”, *Green Chem.* **5** (2003) G46-8.
- [69] A. F. Houry e H. Wehbe, “Towards an environmentally Friendly Chemistry Laboratory: Managing Expired Chemicals”, *Green Chem.* **5** (2003) G49-50.
- [70] W. Leitner, “Focus on Education in Green Chemistry”, *Green Chem.* **6** (2004) 351.
- [71] P. Licence, D. Litchfield, M. P. Dellar e M. Poliakoff, ““Supercriticality”: A Dramatic But Safe Demonstration of the Critical Point”, *Green Chem.* **6** (2004) 352-4.
- [72] L. C. McKenzie, J. E. Thompson, R. Sullivan e J. E. Hutchison, “Green Chemical Processing in the Teaching Laboratory: A Convenient Liquid CO<sub>2</sub> Extraction of Natural Products”, *Green Chem.* **6** (2004) 355-8.
- [73] S. Grant, A. A. Freer, J. M. Winfield, C. Gray e D. Lennon, “Introducing Undergraduates to Green Chemistry: An Interactive Teaching Exercise”, *Green Chem.* **7** (2005) 121-8.
- [74] S. L. Y. Tang, R. L. Smith e M. Poliakoff, “Principles of Green Chemistry: PRODUCTIVELY”, *Green Chem.* **7** (2005) 761-2.
- [75] P. T. Anatas e J. C. Warner, *Green Chemistry – Theory and Practice*, Oxford UP (1998)
- [76] E. J. Woodhouse e S. Breyman, “Green Chemistry as Social Movement?”, *Sci. Techn. & Hum. Values* **30** (2005) 199-22.
- [77] “Presidential Green Chemistry Challenge”, em <http://www.epa.gov/gcc/pubs/pgcc/presgcc.html> (acedido 2007.12.07)
- [78] D. G. Blackmond, A. Armstrong, V. Coombe e A. Wells, “Water in Organocatalytic Processes: Debunking the Myths”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 3798-800.
- [79] R. A. Sheldon, “Organic Synthesis – Past, Present and Future”, *Chem. Ind. (London)* **23** (1992) 903-6.
- [80] A. A. S. C. Machado, “Métricas da Química Verde – A Produtividade Atômica”, *Boletim SPQ*, **107** (2007) 47-55.
- [81] A. A. S. C. Machado, “Alfred Nobel – O “Primeiro Químico Verde”?”, *Boletim SPQ*, **103** (2006) 45-55.
- [82] D. T. Allen e D. R. Shonnard, *Green Engineering – Environmentally Conscious Design of Chemical Processes*, Prentice-Hall (2002)
- [83] R. A. Sheldon, “The E Factor: Fifteen Years On”, *Green Chem.* **9** (2007) 1273-83.

## ACTUALIDADES CIENTÍFICAS

A Konarka anunciou em Março último a primeira produção de células solares orgânicas por impressão com jacto de tinta. O anúncio foi feito nas páginas da revista *Advanced Materials* no artigo « High Photovoltaic Performance of Inkjet Printed Polymer: Fullerene Blends» e demonstra que é possível fabricar células fotovoltaicas de plástico em larga escala e em ambiente pouco exigente.

A deposição dos polímeros utilizados pode ser feita em substratos de grandes dimensões e em produção contí-

nua na forma de rolos, sem exigência dos caros ambientes limpos necessários à maioria das tecnologias que envolvem semicondutores.

Embora as células fotovoltaicas orgânicas apresentem actualmente menores eficiências que as células solares de silício, encontram mercado em nichos de baixa exigência de energia.

O seu baixo custo de produção, especialmente quando comparado com os análogos das células fotovoltaicas inorgânicas tradicionais, tornam-nas

bastante atractivas para utilizações como a alimentação de sensores ou de lâmpadas auxiliares.

[http://www.konarka.com/index.php/site/press/konarka\\_announces\\_first\\_ever\\_demonstration\\_of\\_inkjet\\_printed\\_solar\\_cells](http://www.konarka.com/index.php/site/press/konarka_announces_first_ever_demonstration_of_inkjet_printed_solar_cells)

PS

## Most accessed articles 9/2006 – 8/2007

### Cu<sup>I</sup>-Catalyzed Alkyne–Azide “Click” Cycloadditions from a Mechanistic and Synthetic Perspective

V. D. Bock, H. Hiemstra,  
J. H. van Maarseveen  
*Eur. J. Org. Chem.* 2006, pp. 51–68

### Recent Advances in Asymmetric Organocatalytic 1,4-Conjugate Additions

S. B. Tsogoeva  
*Eur. J. Org. Chem.* 2007, pp. 1701–1716

### Asymmetric Ring-Opening of Epoxides and Aziridines with Carbon Nucleophiles

M. Pineschi  
*Eur. J. Org. Chem.* 2006, pp. 4979–4988

### Gold-Catalyzed Hydroamination of C–C Multiple Bonds

R. A. Widenhofer, X. Han  
*Eur. J. Org. Chem.* 2006, pp. 4555–4563

### Organocatalytic Synthesis of Drugs and Bioactive Natural Products

R. M. de Figueiredo, M. Christmann  
*Eur. J. Org. Chem.* 2007, pp. 2575–2600

Articles were downloaded ca. 500,000  
times in the last 12 months by scientists  
in over 120 countries. *EurJOC* is among  
the top ten most frequently visited  
journals in Wiley InterScience.

For more information please visit:  
[www.eurjoc.org](http://www.eurjoc.org)

Subscribe now!

Please send an e-mail to:

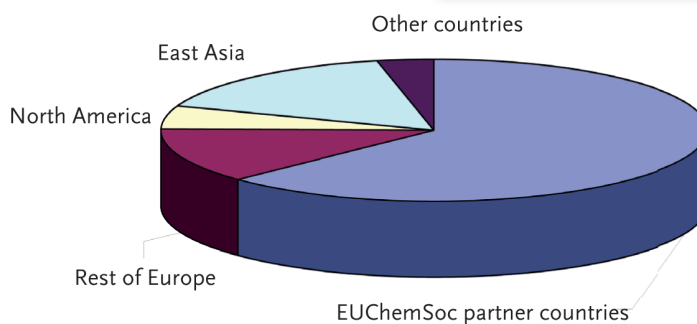
[cs-journals@wiley.com](mailto:cs-journals@wiley.com)  
(North and South America)  
[service@wiley-vch.de](mailto:service@wiley-vch.de)  
(Germany/Austria/Switzerland)  
[cs-journals@wiley.co.uk](mailto:cs-journals@wiley.co.uk)  
(all other areas)



# Made in Europe for the World

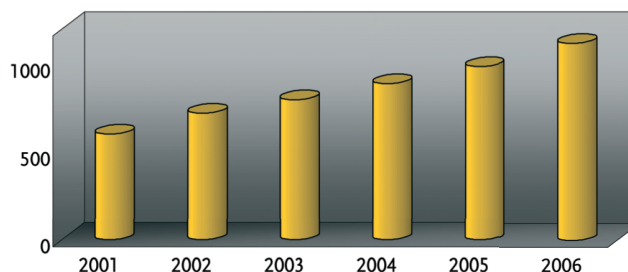


## Geographical distribution of published articles 2006



## Manuscripts received 2001–2006

Since 2002, *EurJOC* has seen an average yearly increase of 11 % in manuscripts submitted.



## *EurJOC* Facts

- ISI Impact Factor (2006): 2.769  
*EurJOC* ranks 18th of 56 journals included in the category “Chemistry, Organic” in the Journal Citation Reports® (ISI Web of Knowledge<sup>SM</sup>). The Median Impact Factor in this category is 1.894 and the Aggregate Impact Factor is 2.564.
- Increased frequency in 2007: 36 Issues
- Owned and supported by the 13 national chemical societies of EUChemSoc (Editorial Union of Chemical Societies)



EUChemSoc

## *EurJOC* offers:

- **RSS Feeds:** be automatically informed of new articles as soon as they are published online in EarlyView
- Citation tracking
- **Backfiles (Liebig's Annalen 1832-1997)**
- Attractive personal subscription rates for society members

## QUÍMICA E ENERGIA O PAPEL DAS CIÊNCIAS QUÍMICAS NA POLÍTICA ENERGÉTICA EUROPEIA

RELATÓRIO ELABORADO PELO GRUPO DE TRABALHO “QUÍMICA E ENERGIA” DA EUChEMS\*

*A energia assume um papel vital nas nossas vidas. Contudo, e em resposta às crescentes preocupações sobre sustentabilidade e preservação do meio ambiente, a União Europeia lançou um conjunto ambicioso de objectivos em termos da eficiência do uso energético e de uma crescente contribuição das fontes de energia renováveis. Este relatório aborda as contribuições que as ciências químicas podem dar para ajudar a UE a atingir as suas metas energéticas.*



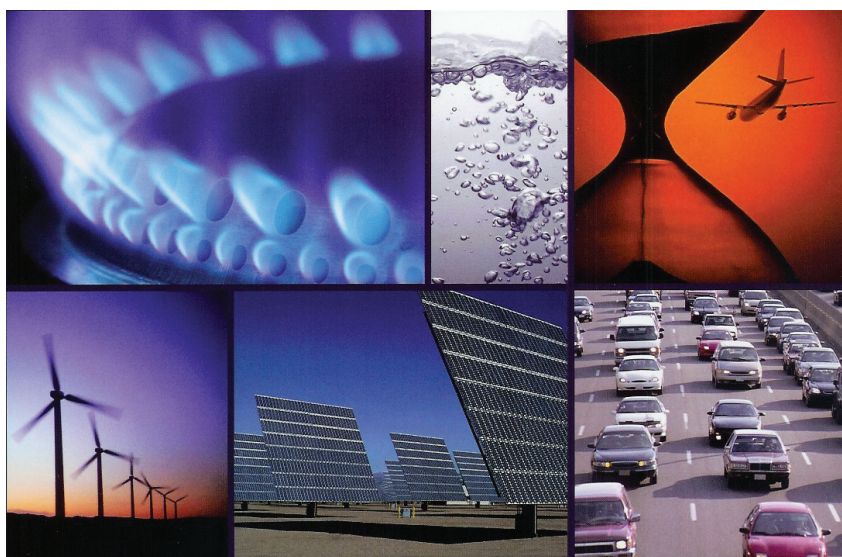
### OBJECTIVO

O relatório tem por objectivo dar orientações aos políticos e agências de financiamento sobre os desafios e as áreas-chave prioritárias numa política europeia de energia. Considera-se que as sociedades químicas podem fornecer tecnologias, infra-estrutura, competências e o envolvimento dos parceiros necessários para atingir as metas ambiciosas propostas pela União Europeia (UE). Este relatório centra-se na apresentação de evidência científica sólida para apoiar as suas recomendações-chave nas áreas da produção, eficiência e transporte de energia.

A Associação Europeia das Ciências Químicas e Moleculares (EuCheMS) é uma organização sem fins lucrativos. O seu objectivo é promover a cooperação na Europa entre as sociedades científicas e tecnológicas sem fins lucrativos na área das ciências químicas e moleculares. A EuCheMS representa os químicos e as sociedades químicas europeias na Europa através das suas actividades e desenvolvimento de políticas. A organização é

sustentada por recursos significativos, tendo 50 sociedades membro que representam cerca de 150000 químicos distribuídos pela academia, indústria e governos, em 35 países europeus.

eficientes para aquecimento, iluminação, transporte, produção de energia e gestão de informação. A Figura 1 compara os consumos energéticos totais e finais (líquidos) na UE.



### CONTEXTUALIZAÇÃO

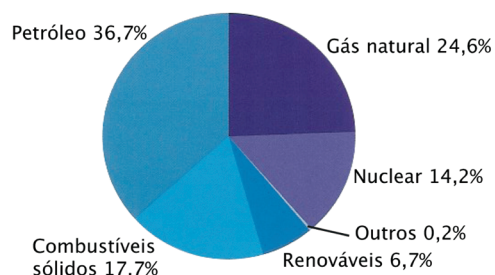
Durante os próximos 50 anos, a Europa deve implementar acções chave para o desenvolvimento de sistemas de energia sustentáveis e gerir a transição de um uso predominante de combustíveis fósseis para um espectro mais largo de fontes de energia. Globalmente, os combustíveis fósseis representam actualmente mais de 80% da procura de energia, com a restante procura satisfeita por uma mistura de energia nuclear (6%), hidroeléctrica (2%) e outras fontes de energia renováveis (12%, que incluem a combustão de biomassa que representa dois terços deste número). As preocupações com a segurança energética e as alterações climáticas devem ser os promotores de uma procura racional e responsável de energia e de tecnologias energeticamente

A UE lidera em termos mundiais a abordagem aos, provavelmente, maiores desafios do século XXI: energia e alterações climáticas. Em Janeiro de 2007 foi anunciada a “Estratégia Europeia para uma Energia Sustentável, Competitiva e Segura”. A Comissão Europeia propôs vários objectivos chave para 2020, que incluem:

- uma redução de 20% na UE das emissões de gases de efeito de estufa, por comparação com os níveis de 1990, ou 30% se outras nações desenvolvidas concordarem em tomar acção idêntica;
- obter 20% da energia total a partir de fontes renováveis;
- poupar 20% de energia através de melhorias da eficiência energética;
- aumentar o uso de biocombustíveis para, pelo menos, 10% de todo o combustível usado para transportes.

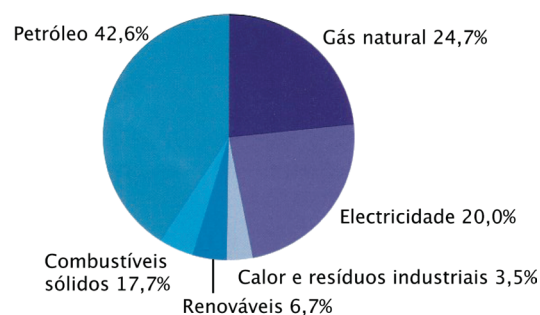
\* Adaptado por JM

### Consumo bruto – UE27 (Ano 2005)



Total aproximado de 1750 MToe  
(MToe=equivalente a Milhões de toneladas de petróleo)

### Consumo de energia final – – UE27 (Ano 2005)



Total aproximado de 1150 MToe

Figura 1 Consumo bruto de energia e consumo de energia final<sup>1</sup>

O processo de transição vai requerer um considerável engenho de químicos, outros cientistas e engenheiros para desenvolverem sistemas de energia sustentáveis e encontrarem formas mais eficientes de produzir, refinar e consumir combustíveis fósseis.

#### PRODUÇÃO DE ENERGIA

O futuro energético na Europa resultará de uma combinação de combustíveis fósseis, renováveis e nuclear (com variações regionais em termos de contribuição destas parcelas). A estatística mostra que o consumo bruto de combustível é de aproximadamente 1750 Mtoe (Mtoe=equivalente a Milhões de toneladas de petróleo), que é cerca de uma vez e meia o consumo final de energia (aproximadamente 1150Mtoe) (ver Fig. 1). Isto significa que se perde cerca de um terço da energia no processo de conversão de combustíveis ou durante o transporte de combustível para o consumidor

final. É, portanto, importante que a energia seja gerada de forma mais eficiente e que as perdas no transporte sejam minimizadas. Isto é válido quer para a situação em que a energia é produzida em instalações de grandes dimensões, ou localmente através de produção distribuída. Os cientistas químicos desempenharão um papel importante no desenvolvimento da próxima geração de materiais supercondutores de alta temperatura crítica que permitirão a redução das perdas durante o transporte de electricidade. A resolução destes problemas pode ter um impacto extraordinário na redução da quantidade de energia que a UE tem que importar para satisfazer as suas necessidades.

#### RENOVÁVEIS

De momento, são consideradas fontes renováveis: a água (hidroeléctrica, ondas, marés), vento, sol (térmico e fotovoltaico), biomassa e terra (geo-

térmica). Algumas destas fontes, tais como a energia eólica, estão disponíveis de forma intermitente e muitas vezes em locais remotos. Como consequência, a rede de transmissão e distribuição tem que ser actualizada, o que requer um investimento significativo de capital. O armazenamento de energia proveniente de fontes de energia renováveis intermitentes é um desafio chave de pesquisa e desenvolvimento. Para as instalações de produção de energia situadas em locais remotos e sob condições adversas (e.g. vento “offshore”, energia de ondas e de marés) há necessidade de utilizar revestimentos, materiais e lubrificantes que aumentem a eficiência e o tempo de vida com custos reduzidos. Em teoria, a energia solar pode satisfazer toda ou uma parte significativa das necessidades Europeias de electricidade. Está em curso o desenvolvimento de tecnologia que permita obter uma eficiência de conversão de cerca de 20%. Os desafios principais são a redução do custo e o aumento da eficiência da tecnologia solar. Estes objectivos podem ser atingidos através de melhorias de *design* e fabrico e do desenvolvimento da próxima geração de tecnologia, e.g. métodos biológicos de captura e armazenamento de energia da luz. A Europa tem uma base de investigação forte e intensa nesta área, particularmente na compreensão e replicação de sistemas fotossintéticos e em células solares orgânicas e com corantes sensibilizadores (“dye-sensitised”) que podem ser usadas como revestimentos de janelas e de materiais de construção. Idealmente, a integração de células solares nos materiais dos edifícios, tais como telhados e janelas, e a sua combinação com sistemas de armazenamento de energia e dispositivos de baixo consumo, tornar-se-ão rotineiras. A necessidade de armazenamento de energia aumentará significativamente com o aumento da proporção das tecnologias de produção de energias renováveis, dado que muitas destas fontes são de fornecimento intermitente. O armazenamento de energia é, não só, essencial para equilibrar o fornecimento intermitente com a procura pelos consumidores, mas tem também um papel importante no comércio de energia, dado que a energia pode ser armazenada e

depois distribuída na rede a um valor mais elevado. Outros aspectos importantes são a segurança e a qualidade do fornecimento. Uma tecnologia de baterias mais avançada é uma opção mas é necessário conseguir um aumento significativo da densidade de armazenamento de energia. Outra opção é a utilização do excesso de electricidade para produzir hidrogénio, embora, como veremos mais adiante, haja questões relacionadas com a produção, armazenamento e transporte de hidrogénio, que é necessário abordar.

#### *Energia fóssil limpa*

Os combustíveis fósseis continuarão a contribuir para a produção de energia. Para desenvolver uma opção limpa para centrais energéticas de combustíveis fósseis, o dióxido de carbono tem que ser capturado e armazenado de forma permanente ou reciclado através do desenvolvimento de opções fiáveis de química com base no CO<sub>2</sub>.

As “tecnologias limpas” também minimizam as emissões de NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, CO, compostos orgânicos voláteis, outros micro-poluente e partículas finas. Se o balanço económico for favorável, há um potencial considerável para que a Europa exporte tecnologias de captura e de armazenamento de carbono (*carbon capture and storage*, CCS). As organizações que estejam envolvidas no desenvolvimento de tecnologias CCS e os projectos de investigação que têm por objectivo a utilização do dióxido de carbono como matéria prima para a síntese, devem ser apoiados. As organizações que desenvolvem as tecnologias CCS necessitarão do apoio da UE ou apoio local para a construção de instalações piloto. As tecnologias CCS que demonstrarem a sua funcionalidade devem ser adoptadas pelas indústrias onde os combustíveis fósseis são usados em grande quantidade e onde as emissões de CO<sub>2</sub> são elevadas. É ainda crítico que um esquema de comercialização das emissões (ou equivalente) na UE seja continuado de modo a incentivar o mercado a remover o CO<sub>2</sub>. É necessário realizar investigação e desenvolvimento substanciais para que a CCS seja tecnológica e economicamente viável. São necessários desen-

volvimentos nas áreas dos materiais, sensores, controladores, química da combustão, modelização de processos químicos e mitigação da poluição. Estes permitirão que os desenvolvimentos mais actuais nas tecnologias limpas dos combustíveis fósseis sejam implementados em larga escala.

Estes desafios incluem:

- a conversão química de grandes quantidades de CO<sub>2</sub> em produtos químicos comercialmente úteis e em combustíveis;
- o desenvolvimento de sistemas eficientes e adequados para capturar CO<sub>2</sub> em várias escalas;
- a identificação, caracterização, monitorização e demonstração de locais de armazenamento de CO<sub>2</sub>.

A fotossíntese artificial é um campo de investigação emergente que procura replicar o processo de fotossíntese natural, convertendo a luz solar, água e dióxido de carbono em hidratos de carbono e oxigénio. O potencial da fotossíntese artificial é enorme dado que permite uma via para a produção sustentável de combustível e, potencialmente, para um processo de remoção do dióxido de carbono da atmosfera criando produtos úteis.

#### *Energia nuclear*

A energia nuclear é um assunto polémico na Europa. O aspecto positivo é que se trata de uma tecnologia de baixo-carbono, demonstrada. O aspecto negativo é o facto de originar resíduos nucleares de longo tempo de vida, cujo armazenamento adequado é dispendioso, envolvendo ainda os riscos de proliferação, poluição radioactiva, terrorismo e zonas de elevada incidência de cancro.

Independentemente de ocorrerem ou não novas construções nucleares, muitos países da UE têm já um longo legado de resíduos nucleares que tem que ser adequadamente gerido. Depósitos geológicos de elevada profundidade constituem a solução preferida cientificamente para conseguir um armazenamento seguro de longo termo. As ciências químicas são essenciais para o “empacotamento” e armazenamento do lixo nuclear e para

assegurar que o ambiente retém os nucleótidos de forma segura. É vital assegurar um transporte seguro do material radioactivo.

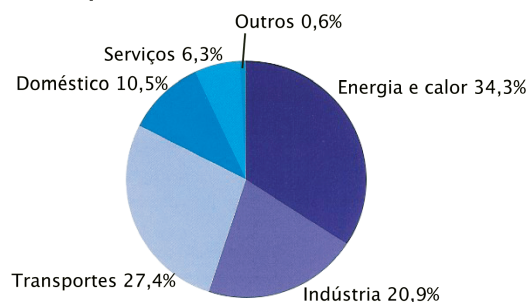
#### *Fusão nuclear*

A decisão de localizar as instalações do reactor de fusão, Reactor Experimental Termonuclear Internacional (ITER), na Europa é bem recebida. Há muitos desafios no desenvolvimento de energia de fusão segura, fiável e económica. Os conhecimentos dos cientistas químicos serão particularmente importantes no *design* de materiais que sejam capazes de suportar as condições extremas e únicas (elevada temperatura e elevado fluxo de neutrões) de um reactor de fusão.

## TRANSPORTES

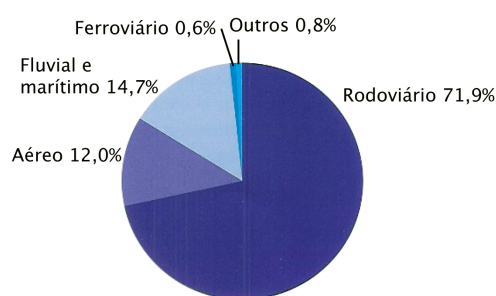
A figura 2 mostra a importância dos transportes (27,4%) no contexto alargado das emissões de dióxido de carbono na UE e a sua origem específica. Os transportes contribuem, significativamente, para as emissões de gases de efeito de estufa na UE. Consequentemente, há necessidade de desenvolver novas tecnologias que originem menos poluição. As ciências químicas desempenham um papel fulcral no desenvolvimento de sistemas que melhorem a qualidade do combustível e os sistemas de exaustão dos veículos. Este papel foi demonstrado através do desenvolvimento de gasolina sem chumbo (erradicando os aditivos de chumbo prejudiciais), aditivos detergentes (que aumentam a economia de combustível e o tempo de vida do motor), combustíveis oxigenados (que melhoram a eficiência dos combustíveis) e conversores catalíticos (para reduzir as emissões de monóxido de carbono, compostos orgânicos voláteis e óxido de azoto). A *performance* dos veículos pode ser também melhorada consideravelmente através da utilização de materiais de construção mais leves para reduzir o peso. O desafio para os químicos de polímeros e de síntese é criar novos materiais estruturais e *designs* que reduzam de forma radical o peso do veículo sem comprometer a segurança. Além disso, podem ser conseguidas melhorias de eficiência através do desenvolvimento de pneus de baixa fricção.

## Emissões de CO<sub>2</sub> – UE27 por Sector (Ano 2005)



Emissão total de CO<sub>2</sub>=4554,4 Milhões de toneladas

## Emissões de CO<sub>2</sub> e transportes – – UE27 por sector (Ano 2005)



Emissão de CO<sub>2</sub> pelos transportes=1247,9 Milhões de toneladas

Figura 2 Origem das emissões de CO<sub>2</sub> na UE<sup>1</sup>

### Biocombustíveis

A primeira geração de biocombustíveis (bioetanol derivado de amido/açúcar ou biodiesel derivado de óleos vegetais/animais) constitui já um tecnologia “madura”. Há alguns desenvolvimentos tecnológicos que poderão melhorar a eficiência de produção. É ainda importante explorar os produtos secundários que resultam da produção de biocombustíveis para acrescentar valor à produção destes combustíveis. Por exemplo, a enorme quantidade de glicerol produzida na esterificação de óleos vegetais para obter biodiesel deverá ser transformada em produtos úteis ou em fontes de energia eficientes, tais como hidrogénio, ou produtos químicos com valor. Este é um objectivo específico na investigação química actual.

A segunda geração de biocombustíveis, que são derivados de biomassa linhocelulósica (tais como palha de cereal, árvores, resíduos de papel, etc.), oferece enorme potencial para a redução de custos e do impacto ambiental, comparados com os biocom-

bustíveis da primeira geração. Além disso, os biocombustíveis de segunda geração não competem necessariamente com a produção alimentar, ao contrário dos de primeira geração. Contudo, há um grande número de barreiras tecnológicas chave que têm que ser ultrapassadas para que os biocombustíveis de segunda geração sejam uma realidade. Prevê-se que, se houver financiamento e esforço adequados aplicados aos biocombustíveis de segunda geração, estarão disponíveis em 2015 operações inteiramente comerciais. Contudo, os biocombustíveis não podem mitigar, *de per se*, o impacto ambiental dos transportes, embora a segunda geração de biocombustíveis possa desempenhar um papel significativo a par de outras medidas. Quer na produção alimentar quer na produção de biocombustível, as ciências químicas estão a desenvolver produtos químicos agrícolas que aumentam a produção de biomassa mas minimizando o impacto ambiental.

### Veículos eléctricos e híbridos

Os veículos híbridos foram recente-

mente introduzidos no mercado. A melhoria destes veículos requer materiais de construção leves, motores eficientes com baixa emissão, e baterias melhoradas ou tecnologia alternativa de armazenamento de energia. O armazenamento de energia é um aspecto chave para o qual os cientistas químicos e de materiais devem contribuir substancialmente. Todos estes aspectos são igualmente aplicáveis aos veículos eléctricos.

### Célula de combustível de hidrogénio

Segundo a Plataforma Tecnológica Europeia para as Células de Combustível e de Hidrogénio (HFC), as aplicações das células de combustível abrangerão quer os transportes quer instalações fixas. É pouco provável que o integral desenvolvimento comercial de hidrogénio para transportes ocorra antes de 2020. Há ainda aspectos que têm que ser adequadamente abordados antes de se poder implementar a comercialização integral. O desenvolvimento de materiais para armazenamento de hidrogénio é um desafio crucial, em particular para as aplicações automóveis.

Novos materiais (redes metalo-orgânicas, redes orgânicas covalentes, nanotubos de carbono e inorgânicos, clateratos, aminoboranos) estão a ser actualmente investigados para procurar atingir níveis de armazenamento de hidrogénio significativos. Por exemplo, o Departamento de Energia dos EUA tem por objectivo, para 2010, o armazenamento de 6%, em peso, de hidrogénio por sistema de armazenamento, e 9% para 2015. O desenvolvimento de novos electrocatalisadores e electrólitos poliméricos sólidos é crucial para aumentar a performance das células de combustível, melhorar a sua robustez, aumentar a flexibilidade em relação à composição do combustível e reduzir os custos de produção. A redução ou a total remoção de metais preciosos, em particular platina, é outro aspecto importante na pesquisa e desenvolvimento para conseguir melhorar a tecnologia das células de combustível. A produção de hidrogénio a partir de biomassa (e.g. via processo de gaseificação ou via bactérias ou algas capazes de digerir os resíduos domésticos e industriais)



ou usando fontes de energia solar (e.g. usando fotossíntese artificial ou energia fotovoltaica) podem constituir opções viáveis.

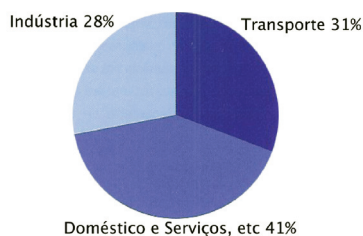
#### Viagens aéreas

O transporte aéreo é alvo de uma atenção crescente devido às preocupações ambientais relacionadas com as emissões de CO<sub>2</sub>, qualidade do ar e ruído. É necessário realizar mais investigação na área da química da atmosfera para avaliar o impacto das emissões dos aviões na troposfera superior. A redução do peso dos aviões aumentará a economia de combustível e reduzirá as emissões. A inclusão de sensores e dispositivos de controle em motores de turbinas a gás inteligentes pode reduzir o ruído, as emissões e os custos através de processos mais eficientes de diagnóstico e de manutenção. São necessários novos materiais (e.g. compósitos de baixo custo, ligas resistentes à corrosão e degradação e materiais inteligentes) para reduzir os custos ao longo de todo o ciclo de vida do produto. Estes podem ainda reduzir o tempo de viagem. É necessário desenvolver revestimentos avançados para a próxima geração de motores de turbinas a gás para melhorar a eficiência dos combustíveis e a redução da emissão. Os biocombustíveis podem também ajudar a reduzir o impacto ambiental da aviação. São necessárias equipas multidisciplinares de químicos, cientistas de materiais e engenheiros para desenvolver soluções viáveis.

#### VIDA DOMÉSTICA

A figura 3 resume a distribuição energética por utilização final.

#### Consumo final de energia – UE27 (Ano 2005)



O consumo total é de aproximadamente 1150 Mtoe

Figura 3 Distribuição do consumo final de energia na UE<sup>1</sup>

Pode verificar-se que a maior parte da energia é consumida no sector doméstico. A implementação de medidas de eficiência energética doméstica pode desempenhar um papel importante no cumprimento dos objectivos da Europa na redução de carbono.

A Plataforma Tecnológica Europeia para uma Química Sustentável (Sus-Chem) está a examinar as habitações como sistemas auto-suficientes em termos de energia e também como ambientes eco-eficientes. A investigação devia focar-se na energia solar para maximizar a captura de energia com baixos custos usando silício ou polímeros conjugados como alternativas para ambientes domésticos. Esta abordagem deve ser combinada com novas tecnologias de produção de painéis solares, materiais híbridos e novos eléctrodos. É necessário desenvolver revestimentos inteligentes para as janelas para regular a temperatura interior. A janela ideal deveria reflectir o calor num dia quente para evitar que a radiação sobreaquecesse o interior de um edifício, mas seria isoladora térmica num dia frio para evitar que o calor escapasse. Há ainda muitas oportunidades para desenvolver materiais isoladores ambientalmente benignos e altamente eficientes que controlem quer a temperatura quer a humidade. Estes incluem nanoespumas de aerogéis, que podem ser obtidos a partir da reciclagem de resíduos e subprodutos. Deveria ser encorajada a aplicação de novos métodos de isolamento para todos os lares através de incentivos.

Os utilitários domésticos que são energeticamente eficientes e que não têm modos "stand-by" deveriam ser encorajados. Sistemas de iluminação eficientes, tais como os díodos emissores de luz orgânicos (OLEDs), podem ajudar a reduzir o consumo de energia. Lâmpadas de iluminação economizadoras de energia são cada vez mais populares mas mais poderia ser feito para encorajar os consumidores a usá-las.

Água para uso doméstico, tratamento de resíduos e reciclagem são áreas chave em que se podem conseguir significativas poupanças de energia. Os desenvolvimentos na química

(bio)catalítica conduzirão a processos de remediação e tratamento de água mais eficientes. Por exemplo, a catálise e a nanotecnologia poderiam ser combinadas para tratar água ou resíduos no sistema de esgotos. Nos resíduos domésticos mistos, a química analítica desempenha um papel fundamental na identificação e segregação de diferentes tipos de resíduos. A química dos polímeros e catalítica é essencial na degradação de plásticos para o fabrico de produtos novos ou de produtos reciclados de qualidade elevada. Químicos e bioquímicos estão a trabalhar intensivamente para desenvolver a nova geração de plásticos, produzidos a partir de recursos renováveis e que sejam biodegradáveis.

#### CIDADES E INFRA-ESTRUTURAS

Aquecimento e transportes são grandes consumidores de energia. É necessário implementar uma abordagem integrada para o fornecimento de energia e infra-estrutura de transportes nas cidades e outros aglomerados populacionais de grandes dimensões. A descentralização das fontes de energia resultaria numa minimização das perdas eléctricas e também diminuiria a sobre-dependência em relação a fontes únicas. Deveria ser encorajada uma economia de electricidade, em particular para a substituição do combustível dos veículos e do gás para o aquecimento central. A electricidade deveria ser gerada a partir de fontes de combustível não-fóssil. Uma economia de electricidade descentralizada gerada a partir de fontes de energia renováveis reduziria as emissões de carbono e a poluição nos centros das cidades causada pelos veículos. Além disso, a infra-estrutura de transportes e a acessibilidade podem ser melhoradas em muitas cidades de forma a limitar os congestionamentos de tráfego e a encorajar as pessoas a utilizar os serviços de transportes públicos.

#### PETRÓLEO E INDÚSTRIA QUÍMICA

As ciências químicas enfrentam o desafio de aumentar o rendimento da extracção de petróleo das reservas globais. O processo subsequente de refinação do crude levanta novos de-

safios: catalisadores que aumentem a eficiência do processo, reduzam o consumo energético e produzam produtos mais puros. A pesquisa e o desenvolvimento de alternativas eficientes, tais como a dessulfuração oxidativa e hidrodessulfuração convencional, devem ser encorajados. Há ainda a necessidade de desenvolver processos com menor consumo energético que substituam a destilação, tais como os que envolvem membranas de separação. A colaboração para as tecnologias de captura e de armazenamento de carbono será essencial.

A indústria química pode atingir reduções significativas de energia através da utilização de processos de elevado débito, novos designs de reactores, micro-reactores, tecnologias de separação avançadas, (bio)catalisadores

mais selectivos, reacções com economia atómica, processos de menor intensidade energética, fontes de energia alternativas (como a luz) e matérias primas alternativas. Os cientistas químicos estão envolvidos no fabrico de componentes avançados para produtos de elevada eficiência e muitas companhias europeias de grande dimensão estão a adoptar estas tecnologias.

### O FUTURO

São necessárias uma visão global e uma liderança em termos mundiais para abordar os temas da energia e das alterações climáticas. O Relatório Stern recomenda uma melhor interligação entre cientistas, políticos e economistas. Quando se trata de implementar alterações, os governos e o público são muitas vezes mais

influenciados pelos argumentos baseados numa lógica económica do que numa informação científica.

A diversificação do fornecimento e das fontes de energia deve ser encorajada; fontes de energia renováveis e sustentadas são uma solução para a sobre-dependência da UE em relação aos combustíveis fósseis. A adopção de fontes de energia renováveis e mais amigas do ambiente pode mitigar alguns dos impactos das alterações climáticas e assegurar uma sustentabilidade energética para as gerações futuras.

#### NOTA:

<sup>1</sup> [http://ec.europa.eu/dgs/energy\\_transport/figures/pocketbook/2007\\_en.htm](http://ec.europa.eu/dgs/energy_transport/figures/pocketbook/2007_en.htm)

## RECOMENDAÇÕES DO GRUPO DE TRABALHO “QUÍMICA E ENERGIA” DA EUChEMs



- Captura e armazenamento de dióxido de carbono (CCS) – É necessário desenvolver processos de captura e sequestração eficientes de dióxido de carbono resultante da produção de energia a partir de combustíveis fósseis.
- Minimização de resíduos, bem como a reciclagem e a recuperação de calor são aspectos que devem ser tidos em consideração na fase de design de produtos. As ciências químicas devem contribuir para o desenvolvimento de novos materiais e produtos que sejam energeticamente eficientes e promovam o uso sustentado de recursos.
- Fontes de energia renováveis altamente eficientes podem ser implementadas com a contribuição das ciências químicas. É necessário desenvolver materiais mais eficientes e de baixo custo para sistemas de conversão de energia solar em energia térmica e eléctrica, bem como materiais duráveis, leves e revestimentos para turbinas.
- Armazenamento de energia e baterias tornaram-se fulcrais para várias tecnologias, incluindo os veículos eléctricos e híbridos e para fontes de energia renováveis. É necessário desenvolver novos materiais para eléctrodos e electrólitos, de modo a aumentar a performance destes dispositivos.
- Energia nuclear continua disponível na União Europeia e é necessário abordar todo o ciclo do combustível nuclear, incluindo o armazenamento dos resíduos em jazidas geológicas, de modo a aumentar a eficiência e a segurança.
- Envolvimento do público e dos media de modo a promover uma alteração de comportamento para uma utilização mais eficiente da energia. Os cientistas químicos deveriam dar o exemplo, fornecendo informação objectiva e factual ao público sobre tópicos actuais, tais como alterações climáticas e tecnologias de energia sustentável.
- Sistemas com inovação efectiva devem estar disponíveis para se proceder a uma transferência de conhecimento e deve haver mecanismos para transferir a tecnologia para o mercado. A indústria deve ser encorajada e apoiada para mudar para processos de produção mais sustentáveis.

## Most accessed articles 9/2006 - 8/2007

**A General and Facile One-Step Synthesis of Imido-Titanium(IV) Complexes: Application to the Synthesis of Compounds Containing Functionalized or Chiral Imido Ligands and Bimetallic Diimido Architectures**

C. Lorber, R. Choukroun, L. Vendier  
*Eur. J. Inorg. Chem.* 2006, 4503–4518

**Classical and Non-Classical Ruthenium-Based Anticancer Drugs: Towards Targeted Chemotherapy**

W. H. Ang, P. J. Dyson  
*Eur. J. Inorg. Chem.* 2006, 4003–4018

**Nanoscope Metal Particles – Synthetic Methods and Potential Applications**

H. Bönemann, R. M. Richards  
*Eur. J. Inorg. Chem.* 2001, 2455–2480

**Nanoparticulated Gold: Syntheses, Structures, Electronics, and Reactivities**

G. Schmid, B. Corain  
*Eur. J. Inorg. Chem.* 2003, 3081–3098

**Osmium- and Ruthenium-Based Phosphorescent Materials: Design, Photophysics, and Utilization in OLED Fabrication**

P. - T. Chou, Y. Chi  
*Eur. J. Inorg. Chem.* 2006, 3319–3332

Full-text downloads have more than doubled since 2003. *EurJIC* is among the top ten most-cited primary journals in inorganic chemistry.

For more information please visit:  
[www.eurjic.org](http://www.eurjic.org)

Subscribe now! Please send an e-mail to:

[cs-journals@wiley.com](mailto:cs-journals@wiley.com)  
(North and South America)  
[service@wiley-vch.de](mailto:service@wiley-vch.de)  
(Germany/Austria/Switzerland)  
[cs-journals@wiley.co.uk](mailto:cs-journals@wiley.co.uk)  
(all other areas)

 WILEY  
InterScience®

 WILEY-VCH

39850801\_eu

# Made in Europe for the World



## EurJIC Facts

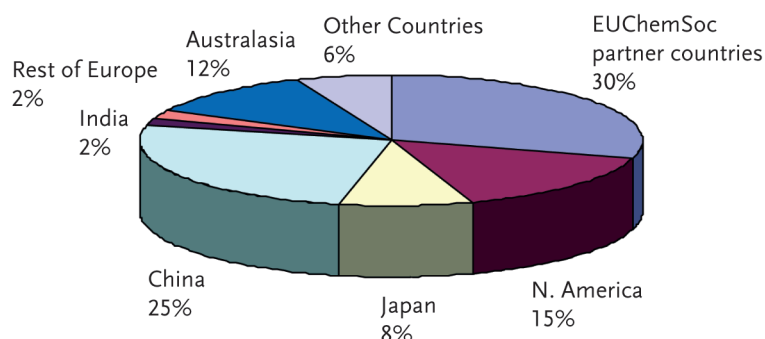
- Short Communications median time from submission to web publication – 10 weeks
- Author submissions have more than doubled since 2001
- Steady increase in impact since the amalgamation of ten national society journals
- Table of Contents redesigned in 2007 to assist browsing
- Templates available for submission of articles
- Increased frequency in 2007: 36 issues
- Owned and supported by 13 national chemical societies in Europe (Editorial Union of Chemical Societies)



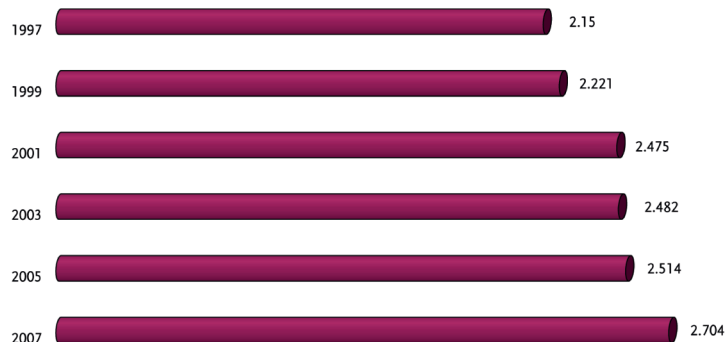
## EurJIC offers:

- RSS feeds 
- Citation tracking
- Table of Contents Alerts
- Backfiles of *Chemische Berichte* (1868–1997) as part of the Chemical Societies Backfiles Collection
- Attractive personal subscription rates for society members

## International interest in *EurJIC* as reflected by the percentage of downloads from each country



## Impact Factors announced in the year given



**EUChemSoc**  
Editorial Union  
of Chemical  
Societies

**CHEMISTRY**  
A EUROPEAN JOURNAL

Concept  
Enantioselective Radical Cyclizations:  
A New Approach to Stereocontrol of Cascade Reactions  
H. Miyabe and Y. Takemoto

Supported by  
**ACES**

WILEY-VCH

CEURJED 13 (20) 2265-2266 (2007) · ISSN 0947-6539 · Vol. 13 · No. 26 · 2007

www.chemeurj.org

2008, Volume 14  
36 Issues  
ISSN: 0947-6539 print  
ISSN: 1521-3765 online

## Made in Europe for the World

*Chemistry - A European Journal* has established itself as a truly international journal with top quality contributions. It is the international forum for outstanding Full Papers, Communications, and Concept and Review Articles from all areas of chemistry and related fields.

**New in 2008:  
Communications**

Increased  
Impact Factor (2006):  
**5.015**

### Selection of most downloaded articles in 2007:

#### Total Synthesis of Five Thapsigargin: Guaianolide Natural Products Exhibiting Sub-Nanomolar SERCA Inhibition

S. P. Andrews, M. Ball, F. Wierschem, E. Cleator, S. Oliver, K. Högenauer, O. Simic, A. Antonello, U. Hüniger, M. D. Smith, S. V. Ley  
*Chem Eur. J.*, **2007**, *13*, 5688 – 5712

#### Phosphorescent Dyes for Organic Light-Emitting Diodes

P.-T. Chou, Y. Chi  
*Chem Eur. J.*, **2007**, *13*, 380 – 395

#### Intra- and Intermolecular Reactions of Indoles with Alkynes Catalyzed by Gold

C. Ferrer, C. H. M. Amijs, A. M. Echavarren  
*Chem Eur. J.*, **2007**, *13*, 1358 – 1373

Supported by

**ACES**

For further information  
and to subscribe  
please send an E-mail to:

[cs-journals@wiley.com](mailto:cs-journals@wiley.com)  
(North and South America)

[service@wiley-vch.de](mailto:service@wiley-vch.de)  
(Germany/Austria/Switzerland)

[cs-journals@wiley.co.uk](mailto:cs-journals@wiley.co.uk)  
(all other regions)

**WILEY-VCH**

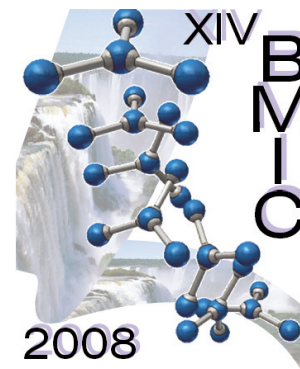
**WILEY**  
**InterScience®**  
DISCOVER SOMETHING GREAT

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

## DESTAQUES

**14<sup>TH</sup> BRAZILIAN MEETING ON INORGANIC CHEMISTRY (BMIC2008)**  
**1<sup>ST</sup> LATIN AMERICAN MEETING ON BIOLOGICAL INORGANIC CHEMISTRY (LABIC2008)**  
**31 AGOSTO-4 SETEMBRO 2008 EM FOZ DO IGUAÇU, BRASIL**

O 14<sup>º</sup> Encontro Brasileiro de Química Inorgânica (BMIC2008) irá decorrer em paralelo com o 1<sup>º</sup> Encontro Latino-Americano de Química Inorgânica Biológica (LABIC2008), entre 31 de Agosto e 4 de Setembro de 2008, em Foz do Iguaçu, Brasil. O BMIC é uma reunião científica bienal que surgiu do Simpósio Nacional de Química Inorgânica (SNQI), um evento importante da Química Inorgânica no Brasil. Rapidamente, o SNQI ganhou um perfil internacional, pelo que se passou a denominar BMIC desde 1998. Presentemente, o BMIC é um dos eventos mais importantes da Sociedade Brasileira de Química, tendo o número de participantes envolvidos, oriundos de diversos países da América do Sul e do Norte, e da Europa, aumentado progressivamente.



E: [sidney@iq.unesp.br](mailto:sidney@iq.unesp.br) URL: [www.iq.unesp.br/bmic2008](http://www.iq.unesp.br/bmic2008)

**7<sup>TH</sup> EUROPEAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL CHEMISTRY**  
**11-15 SETEMBRO 2008 EM SAN SERVOLO, ITÁLIA**

A 7<sup>a</sup> Conferência Europeia de Química Computacional irá decorrer em San Servolo, Veneza, Itália, entre 11 e 15 de Setembro de 2008, uma co-organização da Divisão de Química Computacional da EuChemS (Associação Europeia para as Ciências Químicas e Moleculares, da qual a Sociedade Portuguesa de Química é sócia fundadora) e da Sociedade Italiana de Química. A Conferência está organizada em sete sessões: i) métodos “ab initio” de química quântica, ii) abordagens clássicas e estatísticas, iii) aplicações computacionais à ciência dos materiais, iv) aplicações computacionais às biociências, v) novas tecnologias computacionais, vi) sessão de posters e vii) workshop.



E: [cc7@chimica.unipd.it](mailto:cc7@chimica.unipd.it) URL: [www.chimica.unipd.it/cc7](http://www.chimica.unipd.it/cc7)

**XXVII SYMPOSIUM OF THE SCIENTIFIC INSTRUMENT COMMISSION (SIC2008)**  
**16-21 SETEMBRO 2008 EM LISBOA**

Este ano, entre 16 e 21 de Setembro, o Museu de Ciência da Universidade de Lisboa vai acolher o XXVII Simpósio da Scientific Instrument Commission (SIC2008), uma conferência apoiada pela Sociedade Portuguesa de Química direccionada a todos os interessados em história, preservação, documentação e uso de instrumentos científicos. A Scientific Instrument Commission faz parte da União Internacional de História e Filosofia da Ciência (IUHPS) e tem como principais objectivos o estudo, documentação, preservação e valorização das colecções de instrumentos científicos, bem como promover a sua utilização como fonte para a história da ciência.

O encontro SIC2008 vai reunir em Lisboa cerca de 120 dos mais importantes especialistas mundiais em instrumentos científicos e também prestigiados historiadores da ciência. É a primeira vez que uma reunião com este tema e esta importância se realiza em Portugal. O Museu de Ciência da Universidade de Lisboa pretende, com este encontro, para além de aprofundar e consolidar o nosso conhecimento sobre instrumentos, divulgar o património científico português junto da comunidade científica internacional e também promover estudos de instrumentos e cultura material junto de jovens historiadores da ciência portugueses.

O Programa vai incluir visitas às mais importantes colecções de instrumentos científicos em Portugal, nomeadamente, o Museu de Ciência da Universidade de Lisboa, incluindo o recentemente inaugurado Laboratorio Chimico da Escola Politécnica, o Museu de Marinha em Lisboa, o Museu de Metrologia do Instituto Português de Qualidade na Caparica, o Museu de Farmácia em Lisboa, o Observatório Astronómico da Ajuda em Lisboa, a Colecção de Instrumentos Científicos do Instituto Superior Técnico, o Gabinete de Física da Escola Secundária Passos Manuel em Lisboa, o Museu da Academia das Ciências de Lisboa, o Museu da Ciência da Universidade de Coimbra, o Museu de Física da Universidade de Coimbra, a Colecção de Astronomia da Universidade de Coimbra, o Museu de Ciência da Universidade do Porto, o Museu da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto e o Museu Parada Leitão do Instituto Superior de Engenharia do Porto

E: [sic2008@museus.ul.pt](mailto:sic2008@museus.ul.pt) URL: [chcul.fc.ul.pt/sic2008](http://chcul.fc.ul.pt/sic2008)

**IV REUNIÃO BIENAL DO GERMN**  
**I REUNIÃO IBÉRICA DE RMN**  
**21-24 SETEMBRO 2008 EM SEVILHA, ESPANHA**

O Grupo Especializado de Ressonância Magnética (GERM) da Real Sociedade Espanhola de Química organiza a sua quarta Reunião Bienal em Sevilha. De acordo com as directivas do grupo, o objectivo é fornecer um ponto de encontro a todos os investigadores envolvidos nas várias vertentes da Ressonância Magnética Nuclear (RMN) para apresentar resultados científicos e partilhar ideias e perspectivas de temas de interesse comum.

Com carácter extraordinário a reunião será realizada conjuntamente com a I Reunião Ibérica de RMN. Desta maneira, estas reuniões que têm sido tradicionalmente um ponto de encontro com a comunidade de RMN Portuguesa, incluem formalmente na Comissão Organizadora o Grupo de Ressonância Magnética da Sociedade Portuguesa de Química.

O Programa Científico do encontro incluirá conferências plenárias (45 min), conferências convidadas (30 min), comunicações orais (15 min) e posters, abordando uma grande variedade de aspectos da espectroscopia de RMN. Durante a reunião decorrerá também a Junta Geral do GERM.

Integrado neste evento irá decorrer entre 23 e 27 de Setembro de 2008 a Escola de RMN de sólidos, dirigida a investigadores, estudantes e pessoal técnico familiarizado com RMN de líquidos ou de sólidos. Este curso tem como objectivo difundir e ampliar o conhecimento sobre as bases teóricas e as aplicações da RMN de sólidos, sendo o seu programa centrado nas interacções quadrupolares e bipolares, homo e heteronucleares, de interesse geral no estudo de todo o tipo de sólidos: orgânicos, inorgânicos e biológicos. Serão apresentados exemplos de aplicação da técnica a problemas específicos e, em casos concretos, utilizada a simulação computacional.

E: [bienalgermn08@iiq.csic.es](mailto:bienalgermn08@iiq.csic.es) URL: [bienalgermn08.iiq.csic.es](http://bienalgermn08.iiq.csic.es)

**XXXIII REUNIÓN IBÉRICA DE ADSORCIÓN (XXXIII RIA)**  
**22-24 SETEMBRO 2008 EM MÓSTOLES, ESPANHA**



O Grupo Especializado de Adsorção das Reais Sociedades Espanholas de Química e de Física, organizam a XXXIII Reunião Ibérica de Adsorção, que terá lugar em Móstoles, Madrid, entre 22 e 24 de Setembro de 2008.

A XXXIII Reunião Ibérica de Adsorção pretende ser um fórum multidisciplinar de discussão sobre o processo de adsorção, incluindo temas muito variados, que vão desde os seus aspectos fundamentais até aos mais aplicados. A taxa de inscrição para os sócios da Sociedade Portuguesa de Química é a mesma que a aplicada aos sócios das Reais Sociedades Espanholas de Química e de Física.

Para mais informações consultar a página *web* do evento.

E: [raul.sanz@urjc.es](mailto:raul.sanz@urjc.es) URL: [ria08.urjc.es](http://ria08.urjc.es)

**HANDS-ON COURSE IN MASS SPECTROMETRY FOR PROTEOMICS**  
**22-26 SETEMBRO 2008 EM LISBOA**

Irá decorrer entre 22 e 26 de Setembro de 2008, nas instalações do Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, um curso sobre espectrometria de massa aplicada à proteómica. O curso, limitado a 10 pessoas, será centrado nos aspectos práticos do tratamento de amostras para proteómica (electroforese em gel 1D e 2D, digestão de proteínas em solução e em gel, e MALDI-TOF-MS). Os estudantes são convidados a apresentar um trabalho, em formato poster, relacionado com qualquer dos módulos do curso. O autor do melhor poster terá como prémio a inscrição gratuita no curso.

E: [jlcapelom@dq.fct.unl.pt](mailto:jlcapelom@dq.fct.unl.pt)  
URL: [www.dq.fct.unl.pt/cursos/proteomics\\_MsCourse](http://www.dq.fct.unl.pt/cursos/proteomics_MsCourse)

**HISTORICAL MORTARS CONFERENCE 2008: CHARACTERIZATION, DIAGNOSIS, CONSERVATION, REPAIR AND COMPATIBILITY (HMC08)**  
24-26 SETEMBRO 2008 EM LISBOA

A Historical Mortars Conference 2008 (HMC08) irá decorrer entre 24 e 26 de Setembro de 2008 no Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

As argamassas antigas têm demonstrado grande durabilidade e muito bom desempenho como parte das alvenarias históricas, como revestimentos ou juntas. O conhecimento da sua composição, características de comportamento e mecanismos de degradação, é um assunto de grande relevância, não só do ponto de vista cultural, mas também para o planeamento das intervenções de conservação e a selecção dos materiais e técnicas a usar. Na HMC08 pretende-se divulgar e discutir as conclusões de quatro projectos de investigação que têm sido implementados nos últimos anos pelas instituições organizadoras. Estes projectos envolveram equipas multidisciplinares, facilitando a troca de informações e o trabalho conjunto de investigadores de várias disciplinas necessárias ao estudo das argamassas históricas, como as Engenharias, a Química, a Arquitectura e a Conservação e Restauro.

A HMC08 pretende juntar assim investigadores e técnicos ligados à área da conservação do Património Cultural, promovendo a discussão interdisciplinar para o desenvolvimento científico da conservação de argamassas históricas enquanto património histórico.

E: [hmc08@lnec.pt](mailto:hmc08@lnec.pt) URL: [hmc08.lnec.pt](http://hmc08.lnec.pt)



**1ST PORTUGUESE YOUNG CHEMISTS MEETING (1ST PYCHEM)**  
15-17 OUTUBRO 2008 EM LISBOA

O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da Sociedade Portuguesa de Química organiza o seu primeiro encontro (1st Portuguese Young Chemists Meeting) no Instituto Superior Técnico em Lisboa, nos dias 15 a 17 de Outubro de 2008.

Este encontro será um espaço privilegiado onde os jovens investigadores nacionais, que se encontrem em Portugal ou no estrangeiro, poderão apresentar os seus resultados prioritariamente e sob a forma de comunicações orais *flash* ou posters. Este evento contará ainda com quatro lições plenárias de cariz tutorial sobre temas transversais às diversas áreas da Química, proferidas por quatro investigadores seniores de reconhecida qualidade científica: o Professor Carlos Romão do Instituto de Tecnologia Química e Biológica da Universidade Nova de Lisboa, o Professor João Pedro Conde do Departamento de Engenharia Química e Biológica do Instituto Superior Técnico, o Professor João Rocha do Departamento de Química da Universidade de Aveiro e o Professor Stephen Caddick do Departamento de Química do University College de Londres. Para além da participação activa de diversas empresas da área da Química, a organização conta ainda com o envolvimento de investigadores nacionais, participando e contribuindo com a sua experiência para a qualidade da discussão científica deste encontro. Os PYChem pretendem assim tornar-se um fórum de discussão incontornável no panorama científico nacional.

A data limite para inscrição no encontro com taxa reduzida é 15 de Setembro de 2008.

E: [1pychem@spq.pt](mailto:1pychem@spq.pt) URL: [www.spq.pt/gqj/1pychem](http://www.spq.pt/gqj/1pychem)



**3RD INTERNATIONAL CONFERENCE ON SURFACES, COATINGS AND NANOSTRUCTURED MATERIALS (NANOsmat2008)**  
21-24 OUTUBRO 2008, BARCELONA, ESPANHA

A 3ª NanoSMat irá decorrer em Barcelona, Espanha, entre 21 e 24 de Outubro de 2008. Tal como nas duas edições anteriores da conferência, realizadas em 2005 e 2007, a NanoSMat 2008 irá permitir a reunião de especialistas mundiais em todos os aspectos do processamento, caracterização e aplicações de materiais nanoestruturados, para a troca de ideias e de informação. Um dos principais objectivos das NanoSMat é promover colaborações entre investigadores e profissionais da indústria e assim estimular desenvolvimentos tecnológicos futuros. O sucesso de uma tecnologia torna-se especialmente visível quando é transferida do domínio da investigação laboratorial para aplicações que promovem o desenvolvimento e o bem-estar da sociedade em geral. O evento irá também albergar uma área de exibição e disponibilizar cursos de curta duração envolvendo os conceitos de nanoescala e de materiais nanoestruturados.

E: [info@nanosmat2008.org](mailto:info@nanosmat2008.org) URL: [www.nanosmat2008.org](http://www.nanosmat2008.org)



Secção compilada por Helder Gomes

# AGENDA

## **31 Agosto-3 Setembro 2008 em Belfast, Irlanda**

5th International Conference On Environmental Catalysis  
E: 5icec@qub.ac.uk  
URL: www.centacat.qub.ac.uk/5icec

## **31 Agosto-4 Setembro 2008 em Foz do Iguaçu, Brasil**

14th Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry (BMIC2008)  
1st Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC2008)  
E: sidney@iq.unesp.br  
URL: www.iq.unesp.br/bmic2008

## **2-4 Setembro 2008 em Maputo, Moçambique**

5º Congresso Luso-Moçambicano de Engenharia  
E: sg@fe.up.pt  
URL: paginas.fe.up.pt/clme/2008

## **2-6 Setembro de 2008 em Paris, França**

4th International FEZA Conference (FEZA 2008)  
"Zeolites and related materials: trends, targets and challenges"  
E: feza2008@ccr.jussieu.fr  
URL: www.congres.upmc.fr/feza2008

## **4-6 Setembro 2008 em Braga**

10th International Chemical and Biological Engineering Conference (CHEMPOR 2008)  
E: chempor2005@eq.uc.pt  
URL: www.deb.uminho.pt/chempor2008

## **8-11 Setembro em Namur, Bélgica**

6th International Mesosstructured Materials Symposium (IMMS 2008)  
E: imms2008@fundp.ac.be  
URL: webapps.fundp.ac.be/imms2008

## **11-15 Setembro 2008 em San Servolo, Itália**

7th European Conference on Computational Chemistry  
E: cc7@chimica.unipd.it  
URL: www.chimica.unipd.it/cc7

## **16-20 Setembro 2008 em Torino, Itália**

2nd EuCheMS Chemistry Congress  
E: info@euchems-torino2008.it  
URL: www.euchems-torino2008.it

## **16-21 Setembro 2008 em Lisboa**

XXVII Symposium of the Scientific Instrument Commission (SIC2008)  
E: sic2008@museus.ul.pt  
URL: chcul.fc.ul.pt/sic2008

## **21-24 Setembro 2008 em Sevilha, Espanha**

IV Reunión Bienal do GERMN  
I Reunión Ibérica de RMN  
E: bienalgermn08@iiq.csic.es  
URL: bienalgermn08.iiq.csic.es

## **22-24 Setembro 2008 em Móstoles, Espanha**

XXXIII Reunión Ibérica de Adsorción (XXXIII RIA)  
E: congreso.ria08@urjc.es  
URL: ria08.urjc.es

## **22-26 Setembro 2008 em Lisboa**

Hands-On Course in Mass Spectrometry for Proteomics  
E: jlcapelom@dq.fct.unl.pt  
URL: www.dq.fct.unl.pt/cursos/proteomics\_MsCourse

## **24-26 Setembro 2008 em Lisboa**

Historical Mortars Conference  
E: hmc08@lnec.pt  
URL: hmc08.lnec.pt

## **6-10 Outubro 2008 no Porto**

6th Marie Curie Cutting Edge Conference - Stem cells from the Petri dish to the clinical application  
URL: www.inventscience.org

## **15-17 Outubro 2008 em Lisboa**

1st Portuguese Young Chemists Meeting (1st PYChem)  
E: 1pychem@spq.pt  
URL: www.spq.pt/gqj/1pychem

## **21-24 Outubro 2008 em Barcelona, Espanha**

3rd International Conference on Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials (NanoSMat2008)  
E: info@nanosmat2008.org  
URL: www.nanosmat2008.org

## **10-13 Fevereiro 2009 no Porto**

Segundas Jornadas Luso-Brasileiras de Ensino e Tecnologia em Engenharia (JLBE2009)  
E: jlbe09@isep.ipp.pt  
URL: www.isep.ipp.pt/jlbe09

## **5-8 Abril 2009 em Lisboa**

Fifth International Materials Symposium (MATERIAIS 2009)  
E: materiais2009@ist.utl.pt  
URL: www.demat.ist.utl.pt/materiais2009

## **25 Maio-5 Junho 2009 em Braga**

1st Marie Curie Cutting Edge Practical Training Course: "Fabrication and characterisation of tissue engineering scaffolds"  
URL: www.inventscience.org

## **13-15 Julho 2009 em Granada, Espanha**

III Reunión Ibérica de Colóides e Interfaces  
VIII Reunión del Grupo especializado de Coloides e Interfases de las Reales Sociedades de Química y Física  
E: rici3@ugr.es  
URL: rici3.ugr.es

## **20-24 Julho 2009 no Porto**

International Conference on Nanoscience, Nanoengineering and Nanotechnology (NANO'2009)  
E: sg@fe.up.pt  
URL: paginas.fe.up.pt/clme/nano2009

Secção compilada por Helder Gomes