



INSTITUTO  
SUPERIOR  
TÉCNICO

The background of the slide is a close-up photograph of a glass filled with a vibrant red liquid. Numerous bubbles of varying sizes are rising from the bottom of the glass, creating a dynamic and textured appearance. The lighting is bright, highlighting the reflections on the bubbles and the glass surface.

# Laboratórios Abertos 2012

**Departamento de Engenharia Química**

**Laboratórios Abertos 2012**

**Editado por:**

**Departamento de Engenharia Química**

**Instituto Superior Técnico**

**Edição de:**

**Maria Amélia Lemos, Cristina Gomes de Azevedo**

**Com a colaboração de:**

**Núcleo de Engenharia Química**

**Capa:**

**Maria Amélia Lemos, Cristina Gomes de Azevedo**

**Fevereiro 2012**

**ISBN: 978-989-96933-3-3**

## Índice

Índice .....	3
Programa .....	4
Palestras.....	4
Experiências no Laboratório .....	4
Artesãos do século XXI – Exposição permanente.....	4
Palestras .....	5
Química Medicinal: Como Fazer Fármacos Seguros e Eficientes, da Bancada para o Mercado .....	6
Simetria e Estrutura Molecular .....	10
Papel dos Engenheiros Químicos nas Actividades Produtivas .....	14
Viver Sem Química? .....	15
Produção de Biodiesel – a Aplicação Exemplar da Engenharia Química .....	16
NO News Is Good News.....	22
Geometria Molecular ou A Forma das Moléculas .....	28
O Segredo da Batata Frita e da Carne Bem Passada: Compostos Cancerígenos Fabricados na Cozinha? .....	31
A Química e a Vida .....	37
Química nos Oceanos.....	43
Experiências no Laboratório .....	47
Equipa.....	76
Escolas Participantes .....	78
Patrocínio .....	79

## Programa

	Horário	Actividades
Manhã	10 h - 10:30 h	Palestra
	11 h - 12:30 h	Experiências no laboratório
Tarde	14:30 h - 15:00 h	Palestra
	15:30 h - 17:00 h	Experiências no laboratório

### Palestras

Dia	Hora	Título
06/2/12	10h	Química medicinal: como fazer fármacos seguros e eficientes
	14h 30m	Simetria e estrutura molecular
07/2/12	10h	Papel da Eng. <sup>a</sup> Química nas actividades produtivas
	14h 30m	Viver sem Química?
08/2/12	10h	Produção de biodiesel - aplicação exemplar da Eng. <sup>a</sup> Química
	14h 30m	NO news is good news
09/2/12	10h	Geometria molecular ou a forma das moléculas
	14h 30m	O segredo da batata frita e da carne bem passada
10/2/12	10h	A Química e a vida
	14h 30m	Química nos oceanos

### Experiências no Laboratório

<b>Química e Crime</b>	<b>Show do Azoto</b>
❖ Os elementos do crime	❖ Cozinhando com N <sub>2</sub>
❖ Quem disparou a arma?	❖ O poder do CO <sub>2</sub>
<b>Tecnomagia</b>	<b>Orgânica a Todo o Vapor</b>
❖ Química em movimento	❖ Luz, cor e acção
❖ Levado pelo vento	❖ Orgânica às escuras

### Artesãos do século XXI – Exposição permanente

## Palestras

O formato desta edição dos “Laboratórios Abertos” inclui uma palestra temática seguida de um conjunto de actividades experimentais.

Nesta primeira secção incluem-se os resumos das palestras que se destinam a dar uma visão sobre algum aspecto da Química e da Engenharia Química aplicadas a resolver os problemas do nosso dia-a-dia.

Estas palestras abarcam uma grande variedade de temas, desde a importância da Química nas áreas da saúde, do mar, da alimentação, e como forma de entender a própria vida, até ao papel dos Químicos e Engenheiros Químicos no mundo moderno.

## **Química Medicinal: Como Fazer Fármacos Seguros e Eficientes, da Bancada para o Mercado**

Alexandra M.M. Antunes

Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

Longe vamos dos tempos em que a descoberta de novos fármacos se baseava na tentativa/erro, intuição ou sorte. Hoje em dia, graças aos avanços nas ciências biológicas, temos um conhecimento mais profundo dos alvos biológicos a atingir para alcançar um determinado efeito farmacológico. É neste âmbito que surge a Química Medicinal, que consiste no desenho e síntese de novos fármacos baseado no conhecimento do modo como estes se comportam no nosso organismo ao nível molecular. Como se depreende, esta é uma ciência interdisciplinar que envolve, nomeadamente, conhecimentos de química orgânica, bioquímica, fisiologia, farmacologia e modelação molecular. No entanto, reunir todas estas valências numa só pessoa é uma tarefa impossível pelo que as equipas que trabalham em química medicinal, tanto na indústria farmacêutica como nos centros de investigação, são equipas constituídas por especialistas nestas áreas trabalhando num projecto comum. A tarefa principal de um químico medicinal é o desenho das estratégias sintéticas para a obtenção das moléculas candidatas a fármacos, pelo que deverá ter uma formação avançada na área da síntese e química orgânica. No entanto, tendo em conta a aplicação final destas moléculas, o químico medicinal deverá ter também conhecimentos básicos nas áreas da bioquímica e da farmacologia.

Um fármaco é, em geral, um composto orgânico de baixo peso molecular que deverá interagir com um determinado alvo biológico de modo a produzir um efeito farmacológico. Dever-se-á referir que o efeito provocado pelo fármaco poderá ser benéfico ou prejudicial dependendo da dose administrada. Todos os fármacos são potencialmente tóxicos acima da janela terapêutica.

O primeiro passo para o processo de descoberta de novos fármacos (**Figura 1**) é a identificação do alvo biológico. Na sua grande maioria os alvos biológicos são proteínas que podem ser enzimas, canais iónicos, receptores ou transportadores de moléculas. Há, no entanto, algumas excepções em que os alvos biológicos são por exemplo ácidos nucleicos como é o caso de alguns fármacos anti-microbianos e anti-neoplásicos.

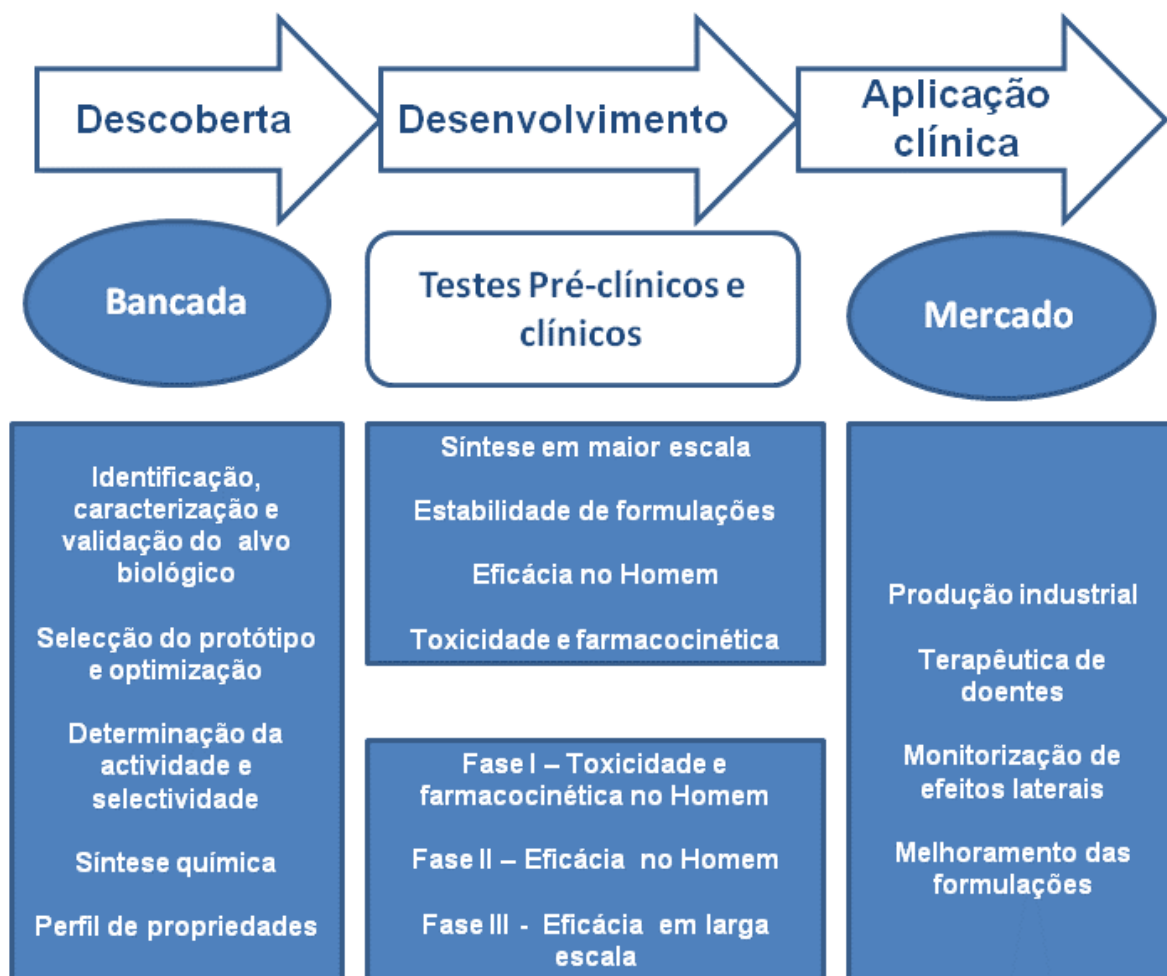


Figura 1. Fases do desenvolvimento de fármacos da bancada até ao mercado.

Para que uma molécula tenha interesse terapêutico tem que mostrar alguma especificidade pelo seu alvo. No entanto, há que referir que nenhum fármaco é completamente específico e, muitas vezes, o aumento da dose poderá levá-lo a afectar outros alvos, provocando efeitos laterais. A ligação da molécula ao alvo terapêutico é governada pela afinidade e poderá resultar na activação ou inibição do efeito ou no bloqueio do efeito, consoante o fármaco se comporte como agonista ou antagonista, respectivamente (Figura 2).

O próximo passo para a descoberta de um novo fármaco será a escolha de um composto químico que vai interagir

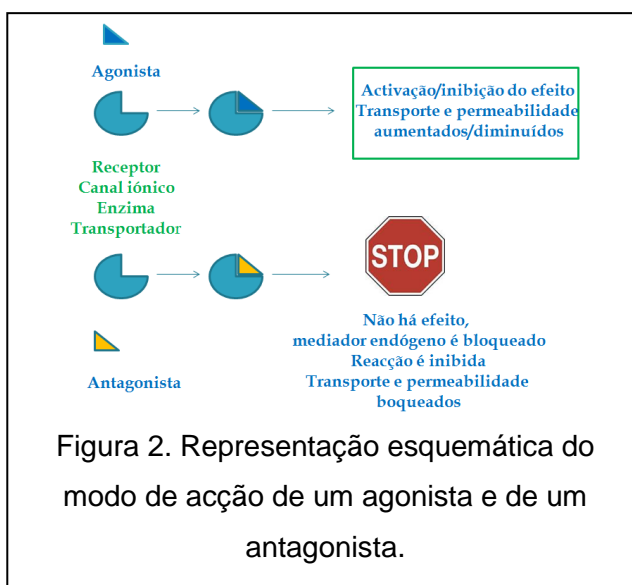


Figura 2. Representação esquemática do modo de acção de um agonista e de um antagonista.

com o alvo biológico escolhido – composto protótipo. Este composto deverá ter alguma propriedade considerada terapêuticamente relevante mas não é o composto que será utilizado como agente clínico, é antes um ponto de partida. Em geral testam-se grandes bibliotecas de compostos de origem natural ou sintética até se chegar ao(s) composto(s) protótipo(s). A selecção deste(s) composto(s) poderá ser efectuada por técnicas de Ressonância Magnética Nuclear e por métodos computacionais. É nesta altura que o químico medicinal começa a desenhar as estratégias sintéticas para a preparação de compostos análogos. Vários compostos são sintetizados e analisados de modo a se estabelecer uma relação estrutura/actividade, permitindo determinar quais os grupos estruturais da molécula que são importantes para garantir interacção com o alvo biológico. No entanto, há que ter em conta que o sucesso de um fármaco não está apenas dependente da sua actividade/ potência, muitas outras propriedades terão que ser avaliadas nomeadamente a sua solubilidade, estabilidade, selectividade, propriedades farmacocinéticas (absorção, distribuição e metabolização) e toxicidade (**Figura 3**). Desta forma depois de serem seleccionados os compostos mais activos estes passarão aos chamados testes pré-clínicos onde serão estudados quanto às suas propriedades farmacocinéticas e toxicidade. Muitos candidatos a fármacos chumbam nesta fase e voltam a ser modificados estruturalmente de modo a melhorar estas propriedades. Estes testes servem ainda para determinar o modo de acção do fármaco, as doses, as potenciais actividades contra outros alvos e testar formulações.



Figura 3. O sucesso de um candidato a fármaco envolve uma espécie de “malabarismo” entre várias propriedades.

Os últimos testes a que os fármacos são submetidos, antes de chegarem ao mercado, são os chamados testes clínicos (Figura 1), onde serão testados em humanos quanto à sua eficácia e toxicidade. De referir que mesmo quando estão no mercado os fármacos são



ainda objecto de estudo. Estes estudos são desenhados de forma a se poder estudar os efeitos a longo-termo e identificar efeitos laterais raros.

Todo este processo é bastante moroso e dispendioso mas necessário para garantir o desenvolvimento de fármacos mais eficazes, selectivos e menos tóxicos. O Químico tem um papel crucial em várias das etapas deste processo (Figura 4).

<b>Qual o Papel do Químico no Processo de Descoberta e Desenvolvimento de Fármacos?</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>✓ <b>Desenvolve vias sintéticas para a preparação dos vários análogos do composto protótipo.</b></li><li>✓ <b>Determina as estruturas dos vários compostos que estão a ser preparados recorrendo a técnicas como a ressonância magnética molecular e a espectrometria de massa.</b></li><li>✓ <b>Sintetiza os possíveis metabolitos dos fármacos para que os seus efeitos laterais e actividade possam ser testados.</b></li><li>✓ <b>Desenvolve métodos sintéticos para a produção de fármacos em larga-escala.</b><ul style="list-style-type: none"><li>✓ <b>Controla a qualidade do fármaco produzido.</b></li></ul></li></ul>

Figura 4. Papel do Químico no processo de descoberta e desenvolvimento de fármacos.

### **Bibliografia**

- 1 Patrick, G. Medicinal Chemistry; In Instant Notes series: Hames, B.D., Ed.; BIOS Scientific Publishers Limited: Oxford, 2001.
- 2 Thomas, G. Fundamentals of Medicinal Chemistry; Wiley: Chichester, 2003.
- 3 Kerns, E.H.; Di, L. Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods from ADME to Toxicity Optimization: Elsevier, London, 2008.

## Simetria e Estrutura Molecular

Laura Maria Ilharco

Centro de Química-Física Molecular, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

Como seres humanos, estamos sensibilizados para reconhecer e apreciar as belezas do universo. Um dos aspectos que confere harmonia aos organismos e objectos que nos rodeiam é a simetria (do grego *symmetria*, que pode ser traduzido como *medida comum* ou *a mesma medida*). Reconhecemos facilmente simetria bilateral numa face, numa borboleta ou numa obra de arte, desde a pintura à música. Intuitivamente, identificamos também simetria rotacional e simetria por inversão em relação a um ponto.

De uma forma geral, pode dizer-se que qualquer operação realizada sobre um objecto que o leve a uma configuração indistinguível da original é uma *operação de simetria* desse objecto. As operações de simetria realizam-se sobre *elementos de simetria*: reflexão num plano, rotação em torno de um eixo, cuja ordem é dada por  $(2\pi/\text{ângulo de rotação})$  e inversão em relação a um ponto.



Figura 1. Uma face ou uma borboleta têm um plano de simetria. Uma carta de jogar tem um eixo de rotação de ordem dois e centro de inversão e uma bola de futebol tem um eixo de rotação de ordem cinco.

Também nas moléculas em repouso, na sua configuração de equilíbrio, é possível identificar elementos de simetria.

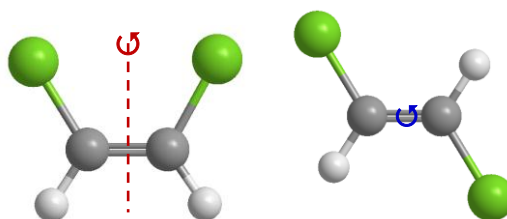


Figura 2. *Cis* e *trans* 1,2-dicloroetano nas configurações de equilíbrio.

Por exemplo, o isómero *cis* do 1,2-dicloroeteno tem um eixo de rotação de ordem dois e dois planos de simetria que contêm o eixo. O isómero *trans* da mesma molécula tem um eixo de rotação de ordem dois (perpendicular ao plano da molécula), um plano de simetria perpendicular ao eixo (o próprio plano da molécula) e centro de inversão.

As moléculas podem ser classificadas conforme os seus elementos de simetria. Como o conjunto das operações de simetria de uma molécula tem propriedades especiais (constitui um *grupo* no sentido matemático) e os elementos de simetria têm pelo menos um ponto comum, estes conjuntos são chamados *grupos pontuais* de simetria.

Mas as moléculas não estão sempre na configuração de equilíbrio: os átomos vibram continuamente em torno das suas posições, mesmo a temperaturas próximas do zero absoluto. Estas vibrações podem ser descritas por modelos. No caso de uma molécula diatómica A-B, o modelo mais simples consiste em considerar que a ligação se comporta como uma mola elástica (oscilador harmónico).

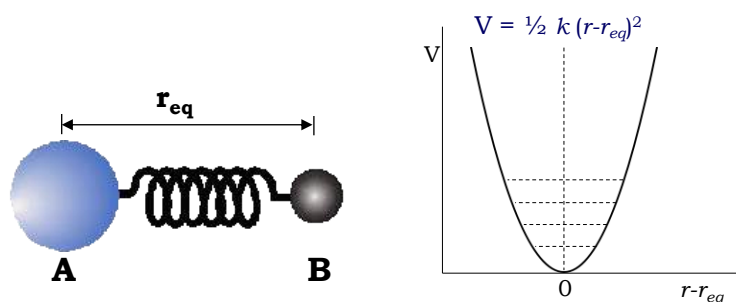


Figura 3. A vibração de uma molécula diatómica pode ser descrita por um oscilador harmónico.

No caso de uma molécula poliatómica, as vibrações podem ser descritas através de um conjunto de movimentos dos átomos com a mesma frequência e em fase, designados por *modos normais de vibração*. O número de modos normais de vibração de uma molécula depende apenas do número de átomos: os dois isómeros do 1,2-dicloroeteno têm doze modos normais de vibração, assim como qualquer molécula não linear constituída por seis átomos (ao número total de graus de liberdade subtraem-se as três translações e as três rotações:  $3 \times 6 - 6 = 12$ ). A descrição e o cálculo das frequências dos modos normais de vibração podem ser feitos através de diversos modelos e métodos, mas para os utilizar é indispensável conhecer a simetria da molécula. Os modos vibracionais dos dois isómeros de 1,2-dicloroeteno têm simetrias e frequências diferentes.

Um dos instrumentos de que dispomos para “observar” as vibrações das moléculas é a radiação electromagnética (luz) na gama do infravermelho: a luz actua como perturbação, excitando as vibrações moleculares, e ao mesmo tempo como sonda das alterações produzidas, dando-nos informação sobre elas. A energia transferida da radiação para a amostra pode ser registada com dispositivos experimentais apropriados e os registos

designam-se *espectros vibracionais* de absorção. Estes traduzem normalmente a variação de intensidade da radiação após ter interactuado com a amostra, em função da frequência ou do comprimento de onda.

Nem todos os modos vibracionais de uma molécula são excitados pelos fótons. O “diálogo” da radiação com a molécula só se estabelece se o campo eléctrico da radiação, que oscila no tempo, interacciona com um campo eléctrico que também oscile na molécula. Se isso não acontecer durante a vibração, esta não é detectada no espectro. Por esta razão o espectro de infravermelho de uma molécula com um grande número de átomos pode ser bem mais simples que o de uma molécula mais pequena.

No caso do 1,2-dicloroeteno, dez dos doze modos normais de vibração são detectados por absorção no infravermelho para o isómero *cis* e apenas seis são observados para o isómero *trans*. Mais uma vez, é a simetria dos modos que determina a sua observação.

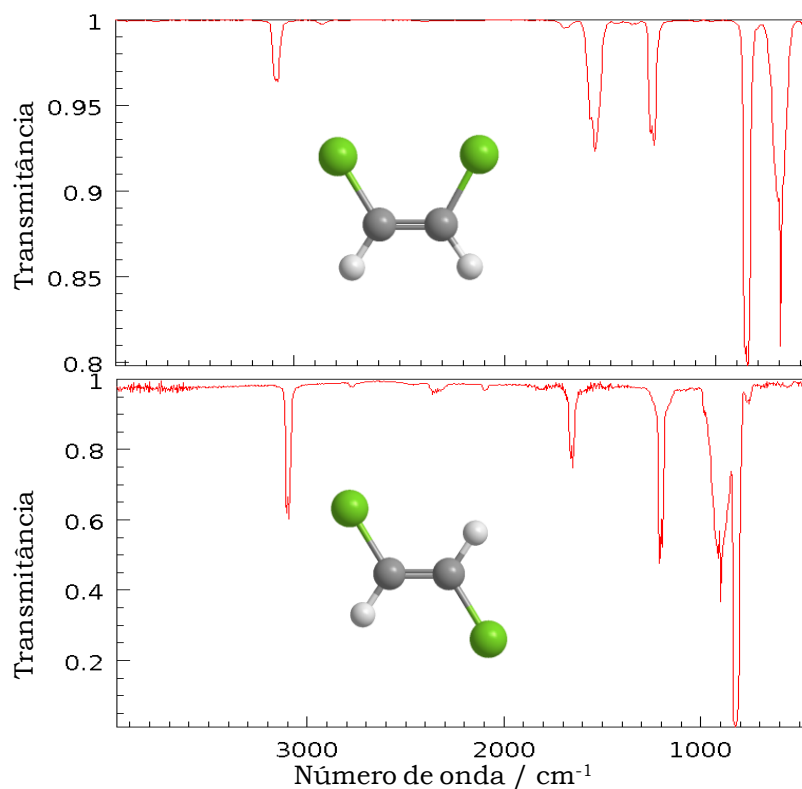


Figura 4. Os espectros de absorção no infravermelho dos isómeros *cis* e *trans* do 1,2-dicloroeteno são diferentes, determinados pela simetria das duas espécies.

As bandas observadas num espectro de infravermelho podem ser atribuídas aos diferentes modos vibracionais e o espectro como um todo correlacionado com a estrutura e a configuração da molécula. Trata-se de verdadeiras *impressões digitais* das moléculas, que permitem a sua identificação.

A simetria não é apenas um símbolo de harmonia e de beleza, mas é de extraordinária importância na interpretação dos espectros moleculares. Traduzida pela linguagem matemática apropriada, a simetria permite estabelecer a ponte entre a realidade do universo e a estrutura das moléculas que o constituem.

Para concluir, um alerta feito pelo Prof. Roald Hoffmann, da Universidade de Cornell, na crítica ao livro “Reflections on Symmetry in Chemistry ... and Elsewhere”, de E. Heilbronnev and L D. Dunk: “A **Simetria** é bela, dá uma sensação de paz e estabilidade. Mas realmente interessante é a **Assimetria**. Na assimetria há variedade e tensão. E riqueza! O que tem interesse nos esteróides não é o esqueleto molecular subjacente, mas a variedade de actividade funcional e biológica que provém das substituições assimétricas.”

### **Bibliografia:**

- J. J. C. Teixeira Dias, “Espectroscopia Molecular - Fundamentos, Métodos e Aplicações”, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1986.
- L. M. Ilharco, “A Espectroscopia de Infravermelho - Uma Técnica Antiga, Sempre Actual”, *Química*, 69 (1998) 34-45.
- E. Heilbronnev, L D. Dunk, “Reflections on Symmetry in Chemistry ... and Elsewhere”, Wiley VCH, Basel, 1993.
- J. S. Ogden, “Introduction to Molecular Symmetry”, Oxford Chemistry Primers, Oxford, 2001.
- D. J. Willock, “Molecular Symmetry”, John Wiley & Sons, Chichester, 2009.

## **Papel dos Engenheiros Químicos nas Actividades Produtivas**

João Moura Bordado

Centro de Engenharia Biológica e Química, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

A muito falada “Crise da Economia do Euro”, parece ter resultado em larga medida, da desindustrialização da Europa, com um número significativo de Industrias a re-localizarem actividades produtivas na China, na Coreia e também na Índia.

O Sector primário, e sobretudo o Sector secundário (indústrias transformadoras) tem grande impacto directo e indirecto sobre a “Saúde” das economias modernas.

Ora acontece que os Engenheiros Químicos com a “polivalência” que caracteriza a respectiva formação e conjunto de competências, tem, como vamos ver, papel muito importante numa larga gama de actividades produtivas.

O que faz então, no dia a dia, o Engenheiro Químico?

- Projecta Novas Fábricas.
- Optimiza o funcionamento de Equipamentos industriais.
- Coordena a Produção e respectivo planeamento.
- Estuda os Processos de fabrico, desenvolvendo novos Processos.
- Controla a Segurança, a Qualidade ou a Protecção do Ambiente

E tudo isto é feito não só em Empresas Químicas, mas também nas que é habitual designar por Para-Químicas ( p.ex. Cimentos, Pasta de Celulose e Papel, Concentração de minérios, Explosivos) e mesmo noutras empresas em que são utilizados produtos químicos, ou em que intervêm reacções químicas no respectivo processo produtivo.

Quando se fabricam “barcos de fibra de vidro”, ou rolhas de champanhe, ou transformadores, ou baterias, ou abrasivos flexíveis ou simplesmente se aplica um corante reactivo para colorir um têxtil, são utilizados processos em que é essencial controlar uma ou mais reacções químicas, e as Competências da Engenharia Química são as que permitem uma abordagem técnica e não puramente empírica de cada um destes processos.

Vão assim ser apresentados exemplos ilustrados das principais actividades dos Engenheiros Químicos.

## Viver Sem Química?

Lubélia Penedo, Joaquim Gândara Marques

APEQ - Associação Portuguesa das Empresas Químicas, Avenida D. Carlos I, 45 – 3º,  
1200 - 646 Lisboa.

*“Muitas vezes esquecemo-nos que os objectos que utilizamos todos os dias existem graças à Química.”*

*“A Química é indispensável à vida de hoje e de amanhã.”*

*“A Química existe para o Homem e para o seu futuro.”*

*Do filme da FEDERCHIMICA “Vivere senza chimica?”*

De facto, no mundo, a Química está em todo o lado, quer queiramos, quer alguns não o neguem:

- Nas pessoas como seres vivos que para o serem, são poderosas e complexas fábricas químicas
- Na doença e na cura – remédios e outras substâncias auxiliares de diagnóstico
- Na prevenção da doença – vacinas, alimentação, hábitos de vida
- Nos alimentos, nas suas embalagens, na sua conservação, no seu transporte
- Na roupa, com têxteis mais adaptados às circunstâncias, mais apropriados às altas temperaturas ou aos gélidos climas doutras regiões, mais fáceis de manter e de limpar, economizando produtos de limpeza, água e energia
- Na resolução de muitos problemas decorrentes das Alterações Climáticas:
  - isolamentos
  - melhoria da eficiência energética
  - sustentabilidade
  - pegada de carbono
  - produções de energia limpa e sustentável
  - transportes mais limpos e sustentáveis
  - redução elevada das emissões de gases com efeito de estufa
- Segurança dos processos e dos produtos
- Transportes menos poluentes, eléctricos ou com combustíveis limpos
- Construção de imóveis adaptados às novas exigências climáticas, com isolamentos e materiais de construção adequados, bem como concepções adaptadas ao local e fim a que se destinam.



## ***Produção de Biodiesel – a Aplicação Exemplar da Engenharia Química\****

Renato H. Carvalho

Iberol – Sociedade Ibérica de Biocombustíveis e Oleaginosas, S.A., Departamento de Desenvolvimento Tecnológico, Quinta da Hortinha - Alhandra, 2601–908 Vila Franca de Xira, Portugal.

Palavras-Chave: Engenharia, Química, Biodiesel, Indústria

### ***Resumo***

Esta apresentação tem como objectivo testemunhar e transmitir a experiência de um Engenheiro Químico no ramo dos biocombustíveis, uma energia renovável focada nos transportes. Explica a importância desta formação académica para a produção industrial de biodiesel, uma indústria simplesmente transformadora.

### ***Introdução***

A **Iberol - Sociedade Ibérica de Biocombustíveis e Oleaginosas, S.A.**, empresa criada em **1967**, tem vindo a desenvolver a sua actividade industrial na produção de farinha e óleo de soja (Figura 1). Desde 2006 que aposta na produção de biodiesel e em 2008 a sua actividade foi alargada ao processamento de sementes de colza, conseguindo assim dar resposta ao mercado e necessidades nacionais na procura deste óleo para os biocombustíveis



Figura 1 – Importação de semente de soja para a extracção de óleo com destino à produção de Biodiesel.

Sendo a Iberol empresa pioneira na indústria de biodiesel em Portugal, apostou desde o início no elevado nível dos seus quadros, tendo na divisão de produção de biodiesel nove licenciados e no seu departamento de controlo de qualidade igualmente cinco licenciados, o

---

\* Texto já publicado em “Laboratórios Abertos 2011”, Departamento de Engenharia Química, Lisboa



que lhe permitiu não só adquirir facilmente as tecnologias internas, como criar potencial para futuros desenvolvimentos.

A Iberol ao apostar em novos mercados assumiu novas responsabilidades para com as metas impostas pelo Governo para a implementação de energias renováveis no sector dos transportes. A inovação é o melhor veículo para acompanhar o veloz desenvolvimento deste mercado e satisfazer assim as necessidades de Portugal. Em 2007, criou um Departamento de Desenvolvimento Tecnológico, com uma estratégia de engenharia e I&DT, directamente dependente da Administração, com a colocação de um Doutoramento em Engenharia Química que lhe permite manter a ligação com as universidades.

No que diz respeito à fábrica de biodiesel, esta tem actualmente capacidade de produção anual de 120 mil toneladas de biodiesel e 14 mil toneladas de glicerina, criando cerca de 105 postos de trabalho directos e centenas de indirectos. A produção é contínua com um regime de laboração de 24 horas por dia, entregando a totalidade da produção à indústria refinadora para a incorporação nos combustíveis rodoviários.

São necessárias tecnologias inovadoras e de integração de processos que permitam produzir biocombustíveis de uma forma enérgica e economicamente eficiente, a partir de uma gama variada de matérias-primas. Actualmente, existe uma enorme variedade de tecnologias para produção de biocombustíveis a partir da biomassa, no entanto, só são comercializados biocombustíveis de primeira geração, sendo ainda necessários importantes avanços para chegarmos à designada segunda geração.

O biodiesel actualmente é produzido por transesterificação de óleos ou gorduras. A transesterificação é a reacção em que os triglicéridos presentes nos óleos vegetais ou gorduras animais reagem com um álcool para formar ésteres e glicerol, catalisada por via ácida ou básica (Figura 2). O metanol e o etanol são os álcoois mais utilizados no processo de transesterificação, sendo o metanol o mais usado por ser mais barato, isento de água, e por permitir uma maior facilidade de separação entre a fase de ésteres e de glicerina.

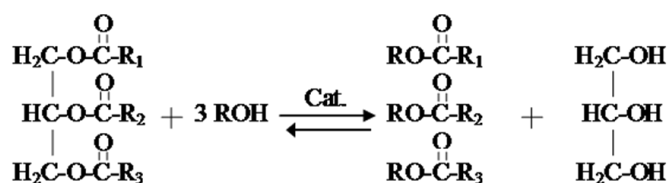


Figura 2 – Reacção de transesterificação.

## O Mercado de Trabalho

A exigência do mercado de trabalho obriga-nos a escolher uma área na qual será baseada toda a nossa formação. Durante o longo percurso de progressão na carreira e geralmente em qualquer profissão de chefia, muitos dos temas necessários para se vencer passam pelo

domínio de política de empresa, gestão de operações, direcção financeira, factor humano, análise social e económica, controlo, direcção comercial e muitos outros.

Cada um destes temas daria por si só um curso/licenciatura, no entanto, podem ser vistos como complementos importantes de uma formação de base sólida, e esta sim extremamente importante. A engenharia química é sem dúvida uma formação abrangente que nos prepara para os desafios do mercado de trabalho.

Um Engenheiro Químico precisa de um vasto leque de conhecimento, desde as ciências básicas como a matemática, a química, a física, assim como disciplinas mais avançadas como processos, termodinâmica, operações unitárias, catálise e muitas outras matérias. Estas matérias têm como finalidade conceber, desenvolver, projectar, dimensionar, otimizar e operar os processos e os seus produtos. Acima de tudo o engenheiro químico é alguém focado para a indústria nos seus vários sectores.

### **O Biodiesel**

O biodiesel “nasce” em Portugal após a constante dificuldade de utilização do óleo de soja, co-produto na produção da respectiva farinha, esta última essencial para as rações animais. Como qualquer arranque de um negócio, este para ser sustentável tem de passar por várias fases no seu tempo de vida:

- ✓ Identificação das oportunidades de investimento (a ideia, a visão, a iniciativa, a necessidade de criar valor ao óleo de soja, os primeiros a ganhar o mercado...);
- ✓ Preparação do pré-projecto (o conhecimento de engenharia química);
- ✓ Avaliação de viabilidade económica (o conhecimento de análise económica);
- ✓ Preparação do projecto de detalhe (o conhecimento de engenharia química e outros);
- ✓ A implementação da obra (o conhecimento de engenharia química e outros);
- ✓ O iniciar a produção (as dificuldades de arranque que um engenheiro químico tem de ultrapassar);
- ✓ A operação e gestão (o controlo das variáveis de processo, a gestão logística e de custos, de recursos humanos...).



Figura 3 – Várias fases durante a implementação da fábrica de biodiesel.

A Indústria de biodiesel é um bom exemplo de como a adaptabilidade de um engenheiro químico é uma variável diferenciadora importante. Cada vez mais a polivalência é um factor extremamente importante numa empresa dada a constante mudança dos mercados, o que obriga uma empresa a ser dinâmica se quer sobreviver no mundo dos negócios e do biodiesel em particular. Actualmente o conceito de “mentes de obra” em vez de mão-de-obra, diferencia uma visão de crescimento sustentável.

O engenheiro químico deve de acompanhar toda a fase e implementação da fábrica (Figura 3), desde a sua estrutura base, à confirmação dos respectivos equipamentos para as operações unitárias que dimensionou, tubagens, tanques de armazenagem, e outras etapas até à fase de arranque. Ninguém melhor que o engenheiro para solucionar os variadíssimos

contratempos que vão aparecendo durante a fase de implementação, ficando assim com um conhecimento profundo da própria unidade, o que lhe proporciona “ferramentas” para solucionar posteriores problemas de operação.

### O Processo

O processo de produção de biodiesel da Iberol é composto por várias etapas conforme descrito na Figura 4. Cada uma destas etapas é composta por várias operações unitárias tais como: mistura dos dois líquidos imiscíveis (óleo e metanol já com o catalisador metilato de sódio misturado), reacção de transesterificação, separação por centrifugação do biodiesel e glicerina, lavagem do biodiesel com água e respectiva separação por centrifugação, secagem a vácuo do biodiesel, recuperação por destilação do metanol em excesso, e muitas outras operações.

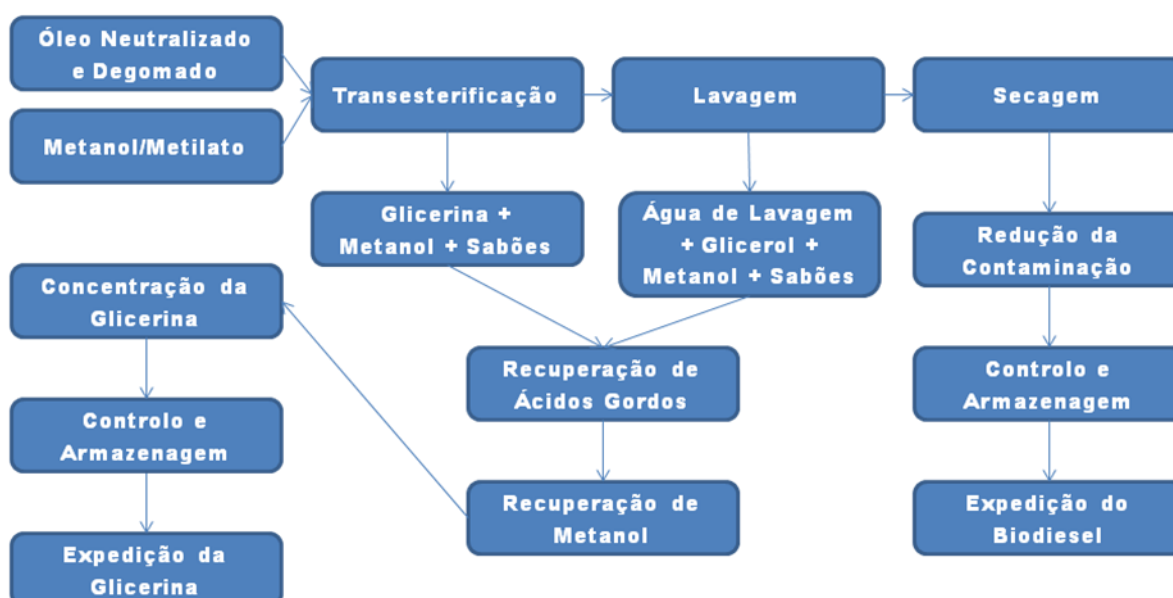


Figura 4 – As várias etapas do processo de produção de biodiesel.

### O Controlo operacional

Todas as operações unitárias podem ser do conhecimento do engenheiro químico, no entanto, é o no controlo operacional que terá a oportunidade de demonstrar a sua capacidade para gerir e otimizar ao longo do tempo as inúmeras variáveis de processo tais como: temperatura, pressão, concentração, densidade, características das matérias-primas e muitas outras, com o auxílio das análises químicas de controlo operacional. Esta gestão implica decisões de manutenção operativa e de planeamento de produção durante todo o ciclo de vida da unidade fabril.

No fundo estes são os desafios de um Engenheiro Químico nesta nova área de biocombustíveis. A Figura 5 ilustra uma amostra do primeiro biodiesel e respectiva glicerina, cujo biodiesel respeitaria a norma EN14214 (norma de qualidade) em Portugal para ser entregue às empresas introdutoras deste biocombustível no mercado.



Figura 5- Primeiro biodiesel e respectiva glicerina após arranque na Unidade de Produção de Biodiesel (UPB) da Iberol.

### Conclusão

A produção de biodiesel é uma indústria química totalmente focada para os conhecimentos de um engenheiro químico. Não escolham este curso em busca de dinheiro ou sucesso, entrem sim a pensar na vossa realização, no gosto pela resolução de problemas e paradigmas, tudo o resto será consequência do vosso trabalho árduo. A engenharia química aborda um vasto leque que cria a base para mais tarde suportar toda a necessidade do conhecimento que é necessário para a experiência profissional.

## **NO News Is Good News**

A. M. Rego<sup>1</sup>, A.M. Ferraria<sup>1</sup>, M. Rei Vilar<sup>2</sup>

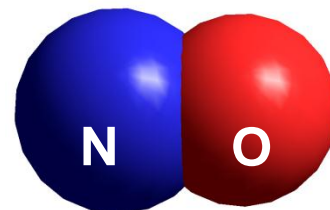
<sup>1</sup>CQFM e IN, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

<sup>2</sup>ITODYS – Interfaces, Traitements, Organisation et Dynamique des Systèmes, Département de Chimie, Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Université de Denis Diderot P7 (Paris)

### **Introdução**

NO news is Good News é um provérbio da língua inglesa que existe em várias outras línguas. Em português: Não há notícias? Boas notícias! Em francês: Pas de nouvelles? Bonnes nouvelles!

Aqui trata-se de um trocadilho em que a "palavra" NO é, de facto, a fórmula de uma pequena molécula, diatómica, constituída por um átomo de nitrogénio e outro de oxigénio: o monóxido de azoto.



Provavelmente já ouviram falar (mal...) desta molécula: ela tinha uma má reputação como poluente vinda dos tubos de escape dos automóveis, do fumo do tabaco, das chaminés das fábricas, contribuinte maior para as chuvas ácidas... Enfim, pode dizer-se que era a má da fita.

Em 1992, porém, tudo mudou: subiu de "má da fita" aos píncaros da glória logo que a revista "Science" a promoveu a "Molécula do Ano"<sup>i</sup>. Este título é atribuído pela revista, anualmente, à molécula mais interessante do ano. O título do artigo onde este "prémio" foi anunciado na Science foi precisamente NO News is Good News, que inspirou o título desta comunicação.

### **Sobre a investigação do NO**

Em 1987, Furchgott descobre a existência de uma substância «misteriosa» produzida nos vasos sanguíneos justamente pelas células que revestem estes vasos, as células do endotélio. Esta substância tinha propriedades notáveis. Chama-lhe EDRF de "Endothelial Derived Relaxing Factor"<sup>ii</sup>. A sua descoberta e a designação escolhida vêm do facto de algumas experiências terem mostrado que o endotélio podia libertar, em certas condições, uma substância vasodilatadora. Assim, a acetilcolina provoca a dilatação de um vaso quando ele está intacto mas não quando se lhe retira o endotélio.

Quase simultaneamente, Ignarro identifica esta substância como o NO<sup>iii</sup> ou, em certos casos, um nitrosotiol como a nitrosocisteína. Murad reconhece a atividade do NO em diferentes órgãos no corpo humano<sup>iv</sup>. Aos três, foi atribuído o prémio Nobel de Medicina em 1998 pelas suas descobertas sobre o óxido nítrico como molécula mensageira do sistema cardiovascular.

O NO é ativo em diferentes partes do corpo humano, tais como o cérebro, as artérias, o sistema imunitário, o fígado, o pâncreas e os pulmões. Esta molécula intervém numa grande variedade de processos fisiológicos: no sistema nervoso (como neurotransmissor), é regulador da pressão sanguínea, tem um papel na aprendizagem e na memória, é mensageira de processos infecciosos, comanda a dilatação dos músculos para não citar outras.

### *O NO nos ataques de asma*

O NO é produzido pelos órgãos infetados; é, em seguida, transmitido ao sistema imunitário que desencadeia as defesas. A asma é uma das múltiplas infeções onde o NO intervém como molécula mensageira. Daí advém que o ar expirado, que num indivíduo saudável contém NO numa concentração de cerca de 10 ppb, isto é uma molécula de NO em mil milhões de moléculas de ar expirado, (pressão parcial de cerca de  $10^{-8}$  atm), e apresenta, num indivíduo com um ataque de asma iminente, concentrações 7 a 8 vezes superiores, dependendo do grau de infeção.

A medição do teor de NO contido no ar expirado torna-se uma ferramenta fundamental para prevenir graves crises de asma e para dosear os respetivos tratamentos quer quanto à quantidade de fármaco a administrar ao doente quer quanto à frequência.

A medição de quantidades tão ínfimas de moléculas quanto algumas partes por “bilião” (ppb) constitui por si só um grande desafio. Actualmente, a medição das baixíssimas concentrações de NO existentes no ar exalado de doentes asmáticos é feita em alguns hospitais. O teor de NO é medido por técnicas de quimioluminiscência que exigem, frequentemente, o internamento do paciente para a monitorização do grau de infeção e também o uso de equipamentos pesados não portáteis.

### *Um sensor portátil de NO*

Uma forma de agilizar a medição do teor de NO no ar expirado, de fazê-lo em tempo real e de reajustar a medicação na exata medida das necessidades do paciente seria o uso de um sensor portátil e descartável.

Uma solução possível baseia-se no MOCSEER (Molecular Controlled Semiconductor Resistor). Trata-se de um dispositivo com estrutura híbrida composta por um semicondutor inorgânico (o transdutor) e por uma monocamada de moléculas orgânicas que contêm os

centros activos para detetar o que se pretende, neste caso o NO (Fig. 1). Quando as moléculas de NO se ligam aos centros activos na monocamada, a corrente através da zona superficial do dispositivo altera-se e pode ser medida num amperímetro. Esta alteração

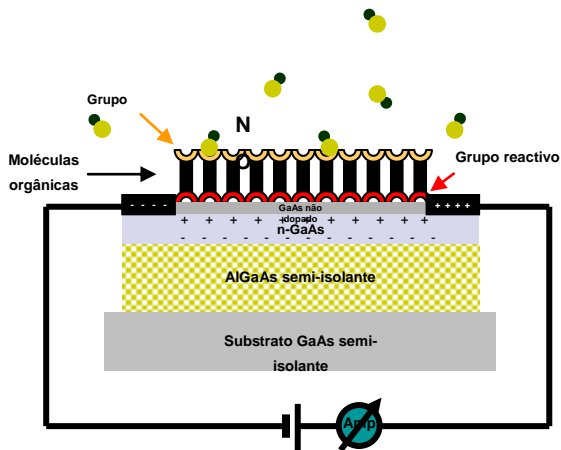


Fig. 1 – Representação esquemática do dispositivo MOCSER

Logo, a funcionalização da superfície do semiconductor com moléculas com capacidade de reconhecimento químico, permite que o dispositivo seja usado como sensor de NO. Moléculas adequadas para o reconhecimento do NO são pois as porfirinas com centros metálicos.

A porfirina de cobalto revelou-se uma boa escolha para detetar o NO porque alia à capacidade para o detetar (detetibilidade), uma boa seletividade<sup>v</sup>, propriedades indispensáveis ao funcionamento correto de um sensor.

resulta de uma variação do potencial elétrico na superfície do semiconductor causada pela fixação do NO no átomo metálico da molécula sonda (uma porfirina da mesma família que a hemoglobina ou a clorofila.

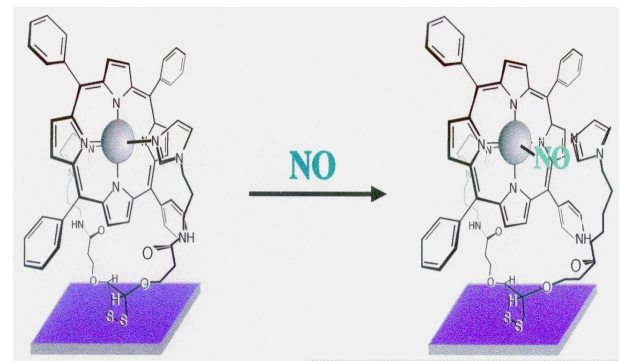
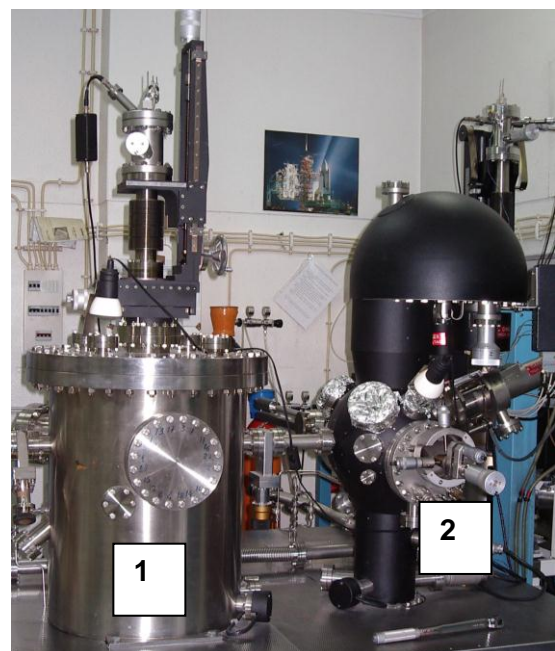


Fig. 2 – O NO liga-se ao átomo de cobalto central. As porfirinas ligam-se ao substrato semiconductor por reações de condensação entre os grupos COOH e os hidroxilos da superfície

### A importância da análise de superfícies no sensor de NO

O fabrico do sensor, tem um passo muito delicado e do qual depende o seu bom funcionamento: o recobrimento da superfície semicondutora de arsenieto de gálio (GaAs) com a monocamada de moléculas de porfirina fixada a ela que dará à superfície propriedades de deteção por reconhecimento molecular. A modificação da superfície

Fig. 3 – Infraestrutura para caracterização de superfícies por espectroscopias eletrónicas: 1- HREELS; 2- XPS





pela camada molecular é designada por funcionalização. Para que essa funcionalização se faça nas melhores condições é necessário estabelecer correlações entre o desempenho do dispositivo e o estado da superfície, – extremamente reativa na presença do oxigênio, da água e dos poluentes atmosféricos habituais, nomeadamente materiais carbonados – as condições de deposição da camada molecular, entre outros parâmetros. Para isso, uma caracterização detalhada da superfície antes e após a reação com a camada molecular é absolutamente necessária. A caracterização química exige técnicas muito específicas dada a quantidade de matéria extremamente pequena que está em causa. Para se ter uma ideia das ordens de grandeza, o número de moléculas sonda (porfirinas) que podem adsorver-se por  $\text{cm}^2$ , é da ordem de  $10^{13}$  a  $10^{15}$ , ou seja, da ordem de  $10^{-11}$  a  $10^{-9}$  mol.

Para a caracterização química de superfícies uma das técnicas mais poderosas que permite saber que átomos estão na superfície, a sua quantidade relativa e em que vizinhança química estão inseridos, é a espectroscopia de fotoelétrão de raios-X (XPS)<sup>vi</sup>. Baseia-se no efeito fotoelétrico: a superfície é irradiada por fótons de alta energia (da ordem dos 1500 eV; para comparação, lembra-se que a energia dos fótons da radiação visível varia entre cerca de 1,5 e cerca de 3 eV. Esses fótons possuem energia suficiente para retirar a um átomo alguns dos seus elétrons internos cuja energia praticamente não é alterada pelo estabelecimento de ligações (ao contrário do que acontece com os de valência). A energia de ionização desses elétrons internos constitui, por isso, uma “impressão digital” de um dado elemento.

Assim, permite identificar os elementos presentes numa superfície (com exceção do hidrogénio e do hélio que só possuem elétrons exteriores). As pequenas modificações (da ordem de alguns décimos a alguns eV) da energia de ionização destes elétrons internos causados pela estrutura dos elétrons de valência – chamadas desvios químicos – permitem tirar ilações sobre a vizinhança química de um dado átomo. A Figura 4 mostra o espectro XPS de uma superfície de GaAs funcionalizada com porfirina o que é indubitavelmente confirmado pela presença de cobalto na superfície. Nas abcissas encontra-se as energias de ligação dos fotoelétrões e nas ordenadas a intensidade de corrente a eles devida.

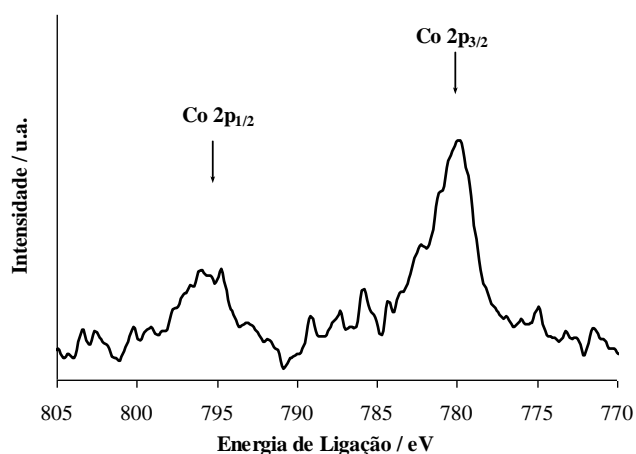


Fig. 4 – Espectro XPS da região do fotoelétrão Co 2p atestando o sucesso da funcionalização do GaAs com a protoporfirina de cobalto

Uma outra técnica de superfície muito poderosa é a espectroscopia de perda de energia de elétrons lentos de alta resolução (HREELS – high resolution electron energy loss spectroscopy). Nesta espectroscopia, um elétron de baixa energia – 0 a ~10 eV) incide numa superfície e interatua com as espécies químicas que nela se encontrem. Nessa interação, perde energia a excitar estados rotacionais, vibracionais e eletrónicos, e mesmo a promover ionizações desde que tenha energia suficiente para isso. É por isso uma espectroscopia muito rica uma vez que com uma só fonte de excitação (um filamento incandescente que emite elétrons) e um só

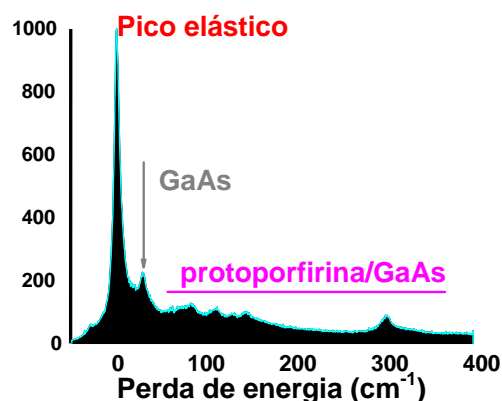


Fig. 5 – Espectro HREELS vibracional de uma monocamada de protoporfirina de cobalto sobre GaAs.

detetor (normalmente um multiplicador de elétrons) consegue varrer as gamas de excitação típicas das espectroscopias ópticas de infravermelho, visível e UV próximo e longínquo. Permite ainda, variando a energia dos elétrons incidentes e/ou a geometria de trabalho, inferir sobre a orientação das espécies moleculares na superfície. Neste trabalho específico, foram exploradas as regiões de excitação vibracional e eletrónica. Ambas atestam o sucesso da funcionalização da superfície com a porfirina. A parte vibracional, em concreto, confirma que os grupos carboxilo da porfirina dão origem a grupos carboxilato responsáveis pela adsorção química, isto é uma ligação forte da porfirina à superfície e não por uma adsorção física, muito mais frágil, induzida por forças intermoleculares (de Van der Waals e/ou por pontes de hidrogénio) que são forças muito mais fracas.

A espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) é outra ferramenta

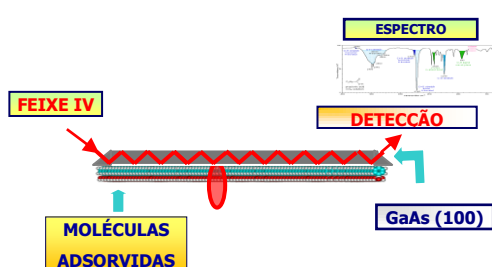


Fig. 6 – Representação esquemática da montagem FTIR em modo ATR/MIR.

fundamental para a identificação de espécies moleculares. É uma técnica de análise de rotina muito utilizada sobretudo para caracterizar moléculas dispersas em pastilhas de KBr (sal transparente no infravermelho). Mas a quantidade de matéria a caracterizar (em transmissão) é da ordem de alguns miligramas, longe, portanto, das algumas nanogramas (ou menos) presentes numa monocamada. A Figura 6 apresenta uma estratégia usada no estudo

“in situ” de adsorções químicas de monocamadas. A radiação sofre múltiplas reflexões internas na placa de GaAs aumentando muito a probabilidade de ser absorvida. Em cada reflexão na face onde se dá a adsorção, é a onda

evanescente (representada pela elipse vermelha num dos pontos de reflexão) que assegura a interação entre a radiação e a interface substrato/solução. A única imposição é a de que as moléculas estejam a ser adsorvidas sobre um substrato transparente à radiação IV. O GaAs está nessa situação pelo que o método é completamente adequado neste caso. Estes estudos permitiram esclarecer o mecanismo de quimissorção através dos parâmetros cinéticos obtidos e, assim, preparar as superfícies dos semicondutores de modo a, pela adsorção da monocamada molecular, conferir-lhes propriedades de reconhecimento químico.

### **Conclusões**

A caracterização de superfícies quer por espetroscopias eletrónicas como o XPS e o HREELS quer por infravermelho em modo ATR/MIR foi decisiva no desenvolvimento de um sensor eficaz e seletivo ao NO. Este sensor pode vir a garantir num futuro próximo uma melhoria significativa da qualidade de vida dos milhões de asmáticos em todo o mundo.

---

### **Bibliografia**

- i. Koshland D.E., *Science*, 258 (1992) 1861-1865.
- ii. Furchgott R.F., *Bioscience Reports*, 19 (1999) 235-251.
- iii. Ignarro L.J., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 38 (13-14) (1999) 1882-1892.
- iv. Murad F., *Rec. Prog. Hormone Research*, 53 (1998) 43-60.
- v. Rei Vilar, M.; Elbeghdadi, J.; Debontridder, F.; Naaman, R.; Arbel, A.; Ferraria, A.M.; Botelho do Rego, A.M. *Material Science and Engineering (C)* 26, (2006) 253 – 259. Erratum: 27, (2007) 933.
- vi. A.M. Botelho do Rego, L.F. Vieira Ferreira, *Handbook of Surfaces and Interfaces of Materials*, Volume 2, Capítulo 7, p. 275-313, Academic Press, 2001.

## Geometria Molecular ou A Forma das Moléculas

Margarida Salema

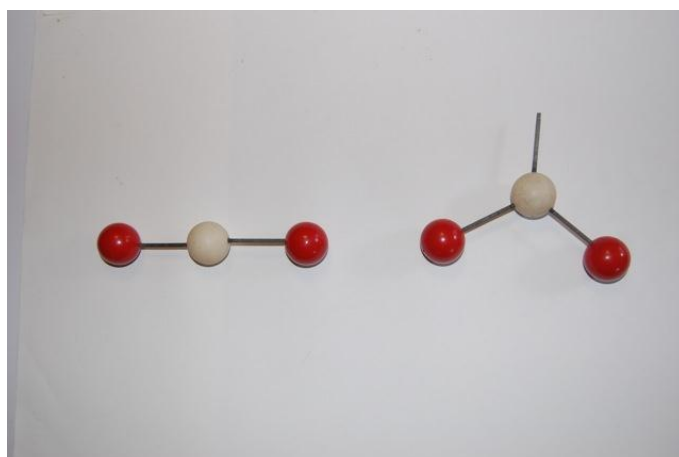
Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av.Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa

“A geometria já existia antes da criação das coisas, eterna como o espírito de Deus; é o próprio deus e foi ela que lhe deu os protótipos para a criação do mundo.”

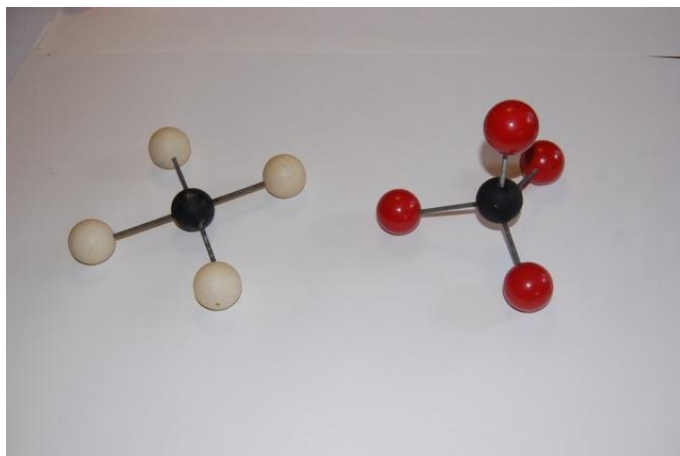
(Johannes Kepler, *Harmonices Mundi*, 1619)

Saber qual é a geometria de uma molécula, ou seja, saber como é que os átomos que a constituem se dispõem no espaço, é extremamente importante, sobretudo para quem queira ou precise de estudar química. Com efeito, sem previamente conhecer a geometria de uma molécula não é possível descrever a sua ligação química, ou o modo como nela os átomos se ligam entre si, quer se use a Teoria de Enlace de Valência, quer a Teoria das Orbitais Moleculares. Da geometria de uma molécula dependem várias propriedades importantes como, por exemplo, a polaridade, com as consequências que daí advêm para as propriedades químicas e físicas das substâncias.

Se uma molécula é diatómica, não é difícil prever a sua geometria: ela é necessariamente, linear. Mas se uma molécula se compõe de três ou mais átomos, o arranjo espacial dos átomos periféricos em torno do, ou dos, átomos centrais, já não é imediatamente previsível. Por exemplo, pode ser mais ou menos sabido que a molécula da água,  $\text{H}_2\text{O}$ , é angular: mas qual é a geometria de  $\text{BeH}_2$ , hidreto de berílio, ou do dicloreto de chumbo,  $\text{PbCl}_2$ ? Angular ou linear?



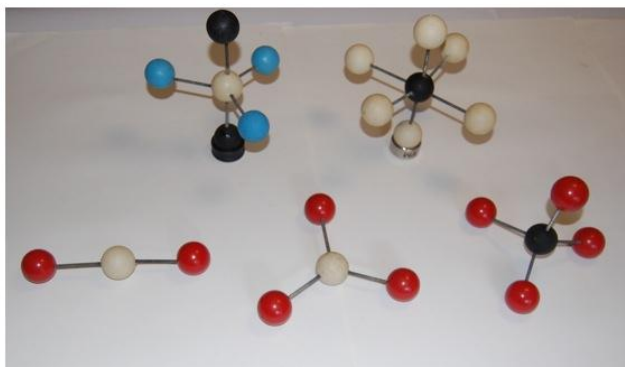
Pode ser conhecida a forma tetraédrica da molécula de metano,  $\text{CH}_4$ , em que o carbono ocupa o centro do tetraedro mas, por exemplo, em  $\text{XeF}_4$ , o tetrafluoreto do gás raro xénon, como é que os quatro flúores se arrumam em torno do xénon? Será também num arranjo tetraédrico, ou em forma de quadrado?



E como poderemos descrever a geometria de uma molécula com mais do que um átomo central, moléculas tão comuns como a do etanol, ou álcool etílico,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ , ou a da dimetilcetona, nome comum acetona,  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  ou a do etino, acetileno,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ?

A Teoria da Repulsão dos Pares Electrónicos da Camada de Valência, **TRPECV** (que não é uma teoria da ligação química), foi desenvolvida por vários químicos em meados do século XX e responde a questões como estas, Assumindo que, se uma molécula pode ter várias geometrias, ela “escolherá” a geometria à qual corresponde a energia mínima, esta teoria propõe que a geometria mais estável é determinada principalmente pelas repulsões entre os pares de electrões que existem na camada de valência do átomo central. Esses pares de electrões vão dispor-se à volta do átomo central de modo a estarem o mais longe possível uns dos outros, de modo a que as repulsões entre eles sejam minimizadas. Consoante o total do número de pares de electrões, a geometria desses pares é fácil de prever, se se pensar no modo como n pares de electrões se podem dispor o mais longe possível uns dos outros. A 2, 3, 4, 5 e 6 pares de electrões corresponderão as geometrias que estão representadas na figura seguinte: linear, triangular plana, tetraédrica, bipirâmide trigonal e octaédrica, respectivamente.

Tendo em conta que, para além dos pares usados nas ligações (os pares partilhados), podem, ou não, existir na molécula pares que não são usados nas ligações (os pares não partilhados), para



prever a geometria de uma dada molécula basta então aprender a fazer quatro coisas simples:

**1** Contar electrões (os da camada de valência do átomo central, mais aqueles com que os átomos periféricos contribuem para estabelecerem as ligações ao átomo central<sup>†</sup>) e dividir por dois para ter o número de pares.

**2** Consoante o número de pares, concluir qual é a geometria de distribuição desses pares de electrões.

**3** Classificar a molécula em termos de geometria (a nomenclatura usada é  $AX_mE_n$ , em que A é o átomo central, X os periféricos a ele ligados, em número de m, E são os n pares não usados nas ligações).

**4** Deduzir qual é a geometria da molécula a partir da geometria dos pares de electrões (se não houver pares não partilhados será a mesma).

Para compreender melhor estas regras gerais que acabámos de apresentar para a previsão da geometria das moléculas através da TRPECV, nada como aplicá-las a diferentes moléculas. Como conceitos básicos necessários, basta que os alunos conheçam a regra do octeto, as estruturas de Lewis e saibam o que é a configuração electrónica de um átomo e a sua camada de valência.

### **Bibliografia**

- 1 R.J. Gillespie, J.Chem.Educ.(1965), 40, 295; ibid, (1970), 47,18; ibid, (1974), 51, 367
- 2 A.Romão Dias, Ligação Química, pág.91-104, ISTPress, 2006
- 3 Margarida Salema, Exercícios sobre Ligação Química, capítulo 2, ISTPress, 2010

---

<sup>†</sup> o número de electrões com que cada átomo periférico X contribui para a camada de valência de A, átomo central, quando da partilha de pares de electrões, é igual ao número de electrões não emparelhados desse átomo, na respectiva estrutura de Lewis. À partilha de um par de electrões entre A e X corresponde a doação de 1 electrão, à partilha de um par duplo, doação de dois electrões e à partilha de um par triplo, doação de três electrões.

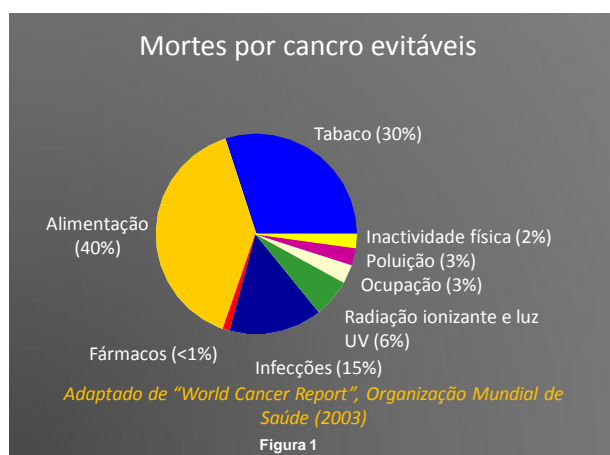
## O Segredo da Batata Frita e da Carne Bem Passada: Compostos Cancerígenos Fabricados na Cozinha?

M. Matilde Marques

Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

### Introdução

O termo *cancro* designa um vasto conjunto de patologias caracterizadas por um crescimento celular descontrolado. As células cancerosas dividem-se e proliferam de modo desregulado,



formando tumores malignos e invadindo outras partes do corpo. As causas do cancro são muito complexas. Contudo, sabe-se que há vários factores que aumentam o risco de cancro. Os compostos ou substâncias capazes de causar cancro ou aumentar a incidência de cancro em animais ou humanos designam-se *agentes cancerígenos*. Estes agentes podem ser compostos químicos, agentes físicos (ex.,

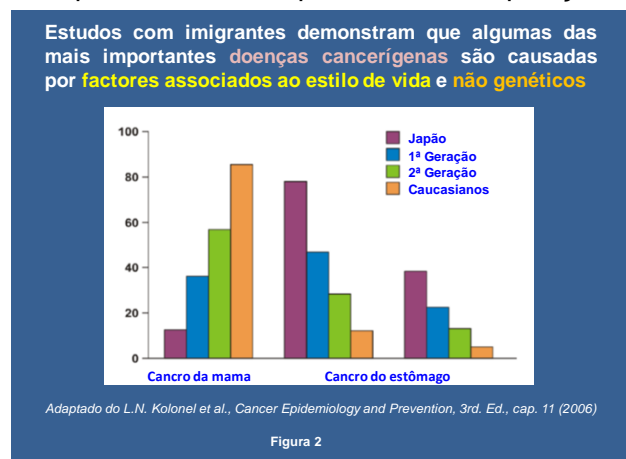
radiação ionizante) ou agentes biológicos (ex., alguns vírus). Os agentes cancerígenos podem alterar e/ou danificar directamente o DNA, que é o sistema básico de codificação celular; designam-se neste caso como *iniciadores*. Podem também ser *promotores* quando "encorajam" o crescimento celular descontrolado, mesmo sem ligação directa ao DNA. Sabe-se hoje que cerca de 5-10% dos casos de cancro têm origem inteiramente hereditária. Porém, na sua maioria, as patologias cancerígenas mais representativas têm origem em factores associados ao estilo de vida. Neste sentido, podemos considerá-las como "evitáveis" (**Figura 1**).

### Relação entre factores ambientais e o cancro

No contexto da investigação sobre o cancro, considera-se *ambiente* tudo o que é externo ao organismo mas entra e interactua com ele. Estima-se que cerca de 2/3 dos casos de cancro (**Tabela 1**) têm origem nalgum tipo de exposição a agentes externos ao organismo (*xenobióticos*). Entre estes contam-se o uso (e abuso) do tabaco e do álcool e também o tipo de alimentação. A evidência de que os hábitos alimentares podem ser um factor de

risco resulta de muitos estudos comparativos da incidência de cancro em países diferentes e das variações observadas nos descendentes de emigrantes. Um exemplo é um conjunto de estudos com pessoas de origem japonesa nos Estados Unidos da América (**Figura 2**). Estes dados significam que é possível evitar a morte prematura por cancro se forem feitas alterações judiciosas no estilo de vida. Sabe-se, por exemplo, que cerca de 1/3 das mortes por cancro poderiam ser evitadas eliminando o uso do tabaco.

É importante referir que não é a exposição ambiental, só por si, o agente causador do



canço. Esta doença é complexa e envolve muitas interações entre genes. Por exemplo, alterações aleatórias nos genes podem acumular-se nas tuas células e não necessariamente nas dos teus colegas ou nas das pessoas da tua família, mesmo que todos estejam expostos ao mesmo tipo de ambiente durante o mesmo tempo. Ao longo da vida, estas alterações nos genes são passadas para novas células à medida que elas crescem e se dividem. Há diferenças individuais em muitos factores (por exemplo variações em enzimas de detoxificação ou genes de reparação) que explicam por que razão algumas pessoas são mais susceptíveis que outras ao aparecimento de tumores.

Tipicamente, quando um composto xenobiótico entra no organismo (através da pele, inalado ou ingerido) e é absorvido passa para a corrente sanguínea, que o distribui a todo o corpo. A maioria destes compostos sofre então um conjunto de reacções químicas catalisadas por enzimas (*reacções metabólicas*), que ocorrem maioritariamente no fígado e cujo objectivo é preparar o composto para ser excretado, tornando-o mais polar e por isso mais solúvel na água. Estas reacções são necessárias para evitar a acumulação de compostos estranhos ao organismo e são geralmente inofensivas. Contudo, por vezes são produzidos compostos muito reactivos (é o que acontece com a maioria dos iniciadores do cancro). Estes compostos (*metabolitos*) podem reagir com o DNA dando lugar à formação de produtos a que chamamos *adutos de DNA*; este processo designa-se *activação metabólica*. Se os

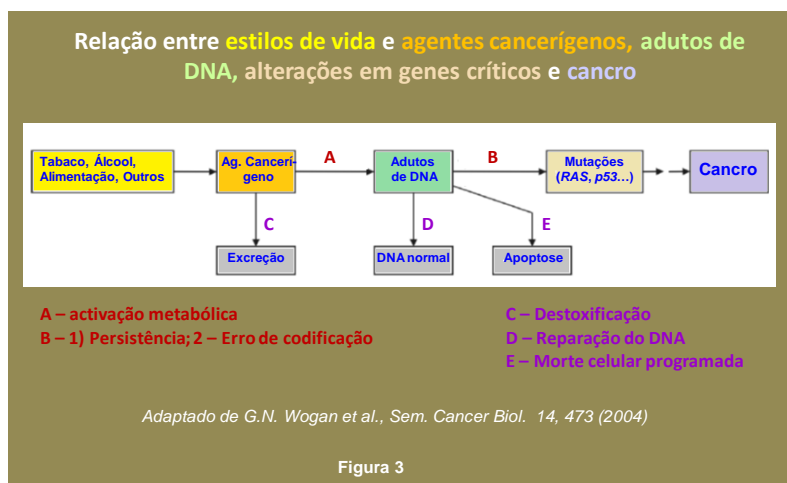
**Tabela 1. Efeitos de factores hereditários e ambientais em vários tipos de cancro**

Local ou tipo	Porcentagem	
	Factores hereditários	Factores ambientais
Estômago	28	62
Colorectal	35	60
Pâncreas	36	64
Pulmão	26	62
Mama	27	67
Colo do útero	0	80
Útero	0	82
Ovário	22	78
Próstata	42	58
Bexiga	31	69
Leucemia	21	66

De um estudo com 44.788 pares de gémeos, Lichtenstein, P., *New Engl. J. Med.* 343, 78 (2000)



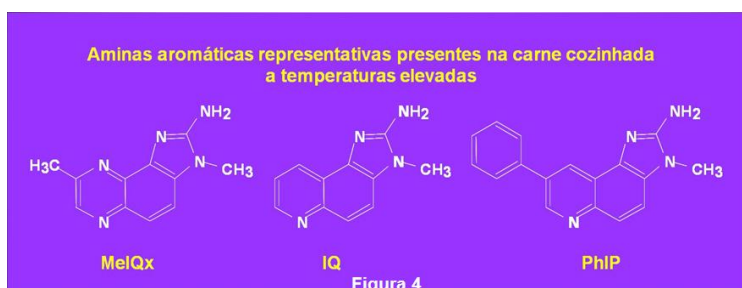
adutos de DNA não forem reparados podem ocorrer mutações em genes críticos para a activação do crescimento celular (por exemplo *RAS*) ou para o seu controlo (por exemplo *p53*). A **Figura 3** mostra, de forma resumida, os vários passos envolvidos neste processo complexo. São discutidos nos parágrafos seguintes alguns aspectos relacionados com a activação



metabólica de dois tipos de agentes iniciadores que são produzidos em alimentos cozinhados a temperaturas elevadas – as aminas aromáticas heterocíclicas (uma classe de compostos com estruturas análogas entre si) e a acrilamida.

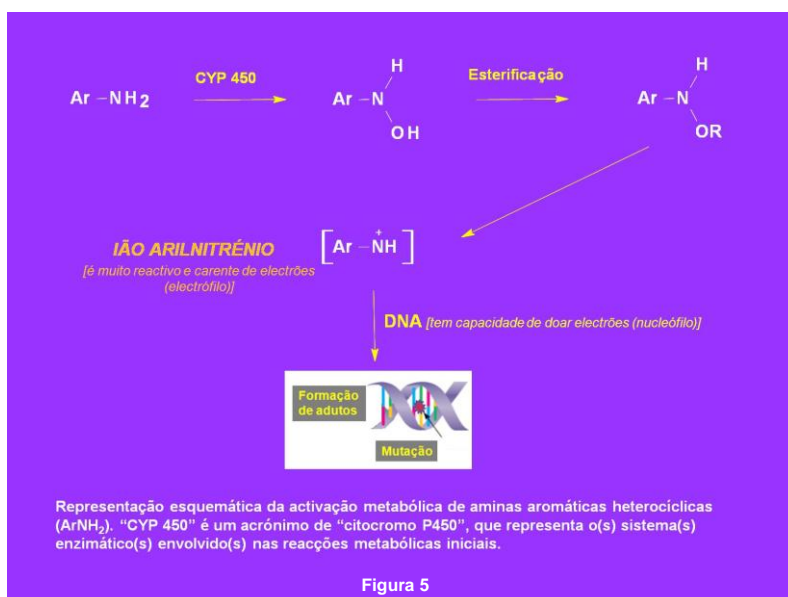
### Aminas Aromáticas Heterocíclicas

As aminas aromáticas heterocíclicas são compostos químicos que se formam quando os tecidos musculares da carne (vaca, porco, peixe, frango) são cozinhados a temperaturas elevadas (por exemplo fritos ou grelhados). A **Figura 4** mostra algumas estruturas representativas deste tipo de compostos. O termo *heterocíclico* significa que os anéis contêm átomos diferentes do carbono (neste caso azotos). A formação destes compostos



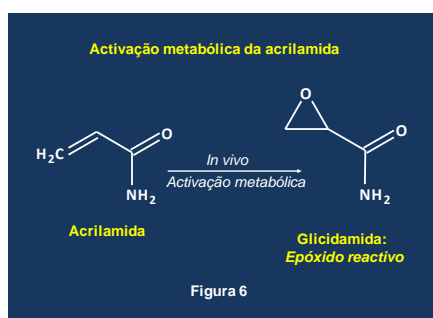
(tipo e concentração) depende do tipo de carne, bem como do tempo e da temperatura a que são preparados. As aminas aromáticas heterocíclicas são mutagénicas e sabe-se que são carcinogénicas em animais. A carcinogenicidade destes compostos em humanos é mais difícil de demonstrar porque não é fácil determinar os níveis de exposição a que uma pessoa está sujeita (apenas se conseguem estimativas, com base em respostas a questionários sobre hábitos alimentares). Apesar disso, os estudos disponíveis sugerem que o consumo de carne frita ou grelhada, sobretudo bem passada, está associado a um risco acrescido de cancro colo-rectal, pancreático e da próstata. Estes dados aconselham que se evite o consumo excessivo de carne bem passada, exposta directamente à chama ou cozinhada numa superfície metálica muito quente.

As aminas aromáticas heterocíclicas formam-se quando os amino ácidos (blocos de construção das proteínas), açúcares e creatina (um ácido orgânico azotado que está presente nos músculos) reagem entre si a temperaturas elevadas. Não se encontram noutros tipos de alimentos para além da carne. Sabe-se que as aminas aromáticas heterocíclicas só alteram o DNA após bioactivação metabólica, tal como se exemplifica na **Figura 5**. A actividade das enzimas que catalisam as transformações metabólicas varia de pessoa para pessoa, o que explica que os riscos individuais de cancro associados à exposição a estes (ou quaisquer outros) compostos possam ser muito diferentes.



## Acrilamida

A acrilamida (**Figura 6**) é um composto químico muito utilizado na produção de materiais poliméricos (poliacrilamidas) que são, por exemplo, aplicados como materiais espessantes no tratamento de águas residuais, em electroforese e na produção de papel. Também se encontra acrilamida no fumo do tabaco. Em Abril de 2002 um grupo de cientistas suecos descobriu acidentalmente que a acrilamida está presente em alimentos amiláceos (*i.e.*, contendo amido) cozinhados a temperaturas elevadas, como as batatas fritas, certos tipos de pão e o café, sendo a sua



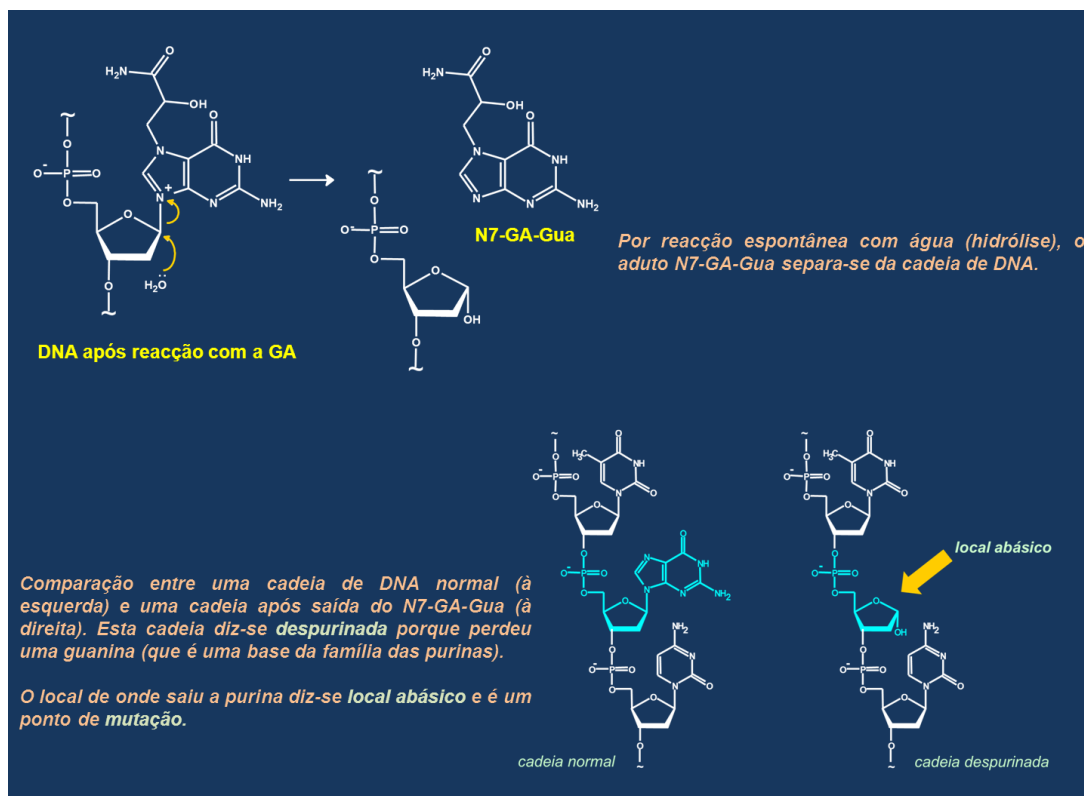
concentração dependente da temperatura a que os alimentos são processados (**Tabela 2**). A presença da acrilamida em alimentos é um motivo de preocupação porque se trata de um composto cancerígeno.

A acrilamida forma-se como resultado de uma reacção química, denominada reacção de Maillard, que ocorre entre o amino ácido asparagina e alguns açúcares. Os estudos que têm sido realizados indicam que a carcinogenicidade da acrilamida resulta da

Acrilamida: µg por dose <sup>1</sup>	
Água, 200 mL, limite EPA	0.10
Batatas cozidas, 113 g	<3
Batatas fritas Burger King, 162 g	59
Batatas fritas McDonald's, 176 g	82
Pringles BarBQ, 100 g	251
⇒ Exposição total num adulto ca. 0.3-0.8 µg/kg/dia (estimativa da OMS <sup>2</sup> )	

1- Dados do Center for Food Safety and Nutrition, Estados Unidos (www.cfsan.fda.gov)  
2 - OMS, Organização Mundial de Saúde

sua conversão metabólica (*i.e.*, *in vivo*) em glicidamida (GA), que é um composto muito reactivo pertencente à família dos epóxidos. A glicidamida reage com o DNA dando um conjunto de adutos cuja estrutura está bem identificada. A título de exemplo mostra-se na **Figura 7** como a formação de um desses adutos (designado N7-GA-Gua), que ocorre por ligação da glicidamida à guanina, pode dar origem a mutações.



**Figura 7**

## Conclusões

Muitos estudos demonstram que os factores ambientais são determinantes para o risco de contrair cancro ao longo da vida. Muitos destes factores estão associados ao estilo de vida e podem ser controlados. Os exemplos de compostos cancerígenos aqui apresentados são representativos de espécies que, embora não existam naturalmente nas matérias primas usadas na alimentação, são produzidas durante os processos de preparação a temperaturas elevadas. Como se discutiu acima, uma vez absorvidas pelo organismo estas espécies são activadas por via metabólica a compostos muito reactivos que reagem com o DNA dando produtos (adutos de DNA) que podem originar mutações. Embora, a nível individual, as pessoas tenham susceptibilidades diferentes a estas transformações, é importante conhecer as razões para os riscos associados a estes processos. Só assim é possível fazer escolhas informadas sobre os nossos comportamentos (ex., eliminar o uso do tabaco, moderar o

consumo do álcool, fazer uma dieta de composição variada) de modo a baixar o nosso risco individual de contrair cancro.

### *Para saberes mais...*

*National Cancer Institute dos Estados Unidos*

<http://www.cancer.gov/cancertopics/understandingcancer/environment>

*Alimentação e cancro*

[http://en.wikipedia.org/wiki/Diet\\_and\\_cancer](http://en.wikipedia.org/wiki/Diet_and_cancer)

*The Cancer Project*

[http://www.cancerproject.org/diet\\_cancer/facts/meat.php](http://www.cancerproject.org/diet_cancer/facts/meat.php)

*Center for Food Safety and Nutrition*

<http://www.fda.gov/downloads/Food/FoodSafety/FoodContaminantsAdulteration/ChemicalContaminants/Acrylamide/UCM197239.pdf>

*Conjunto de excelentes slides sobre carcinogénese da autoria do professor Ivan Rusyn, University of North Carolina at Chapel Hill, Estados Unidos*

[http://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=36&ved=0CEYQFjAFOB4&url=http%3A%2F%2Frusynlab.unc.edu%2Fpublications%2Fcourse\\_data%2FCarcinogenesis%25202011.ppt&ei=IHdGT77BlcnV8gPuwOi7Dg&usg=AFQjCNGKICmEneynXTnOBVmEzzwscz064w](http://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=36&ved=0CEYQFjAFOB4&url=http%3A%2F%2Frusynlab.unc.edu%2Fpublications%2Fcourse_data%2FCarcinogenesis%25202011.ppt&ei=IHdGT77BlcnV8gPuwOi7Dg&usg=AFQjCNGKICmEneynXTnOBVmEzzwscz064w)

## **A Química e a Vida**

José A. L. da Silva

Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Av. Rovisco Pais, 1, 1049-001 Lisboa – Portugal.

Em 2011 foi comemorado o Ano Internacional da Química, mas falar desta ciência não se pode restringir apenas a esse ano, dado que ela está presente no nosso dia a dia. Esta asserção é comprovada no vestuário, calçado, alimentação, medicamentos, etc. Relativamente aos dois primeiros tópicos, temos, por vezes, a tendência para dar atenção às marcas, ao *design* ou estar *fashion* (ou melhor, na moda) e esquecemo-nos que por de trás dos materiais adequados ao seu fabrico, no respeitante, por exemplo, à sua textura ou cores está trabalho relevante de Química. Acerca da alimentação é conveniente recordarmos-nos que para serem utilizadas novas embalagens, possíveis a conservação das bebidas e das comidas e a sua boa apresentação é imprescindível muita investigação efetuada pelos químicos antes desses produtos chegarem aos consumidores. No âmbito dos fármacos usados em diagnóstico e em terapia, estes são produtos químicos que podem ser isolados de produtos naturais ou sintetizados, os quais podem prevenir situações graves ou curar problemas de saúde, sendo assim evidente a importância da Química nestes domínios. Esta ciência permite inclusive fazer análises que permitem ter informações acerca de ocorrências de outrora. Na realidade, a Química permite conhecer melhor o passado, aumentar o nosso conforto, resolver problemas no dia a dia, além de facilitar a previsibilidade de vários fenómenos. Saber o básico desta ciência torna necessário conhecer algo acerca dos elementos químicos da Tabela Periódica, os quais, convém não esquecer, são os constituintes de tudo o que nos rodeia, sendo este fato igualmente válido para todos os seres vivos.

Todos os organismos vivos são constituídos por alguns dos elementos químicos da Tabela Periódica que apresentam pelo menos um isótopo estável ou com um período de semivida suficientemente longo para não causar danos graves no organismo. A escolha dos elementos químicos pelos seres vivos está relacionada com a sua abundância, disponibilidade (a qual está associada com possibilidade dos elementos químicos serem transportados do meio envolvente até ao organismo e depois assimilados por este sem um gasto elevado de energia) e eficiência funcional [que possibilita determinadas reações (bio)químicas]. Por isso, sem conhecermos melhor os elementos químicos não podemos saber muito acerca dos organismos vivos e das suas moléculas. É comum pensar-se serem

pouco mais de meia dúzia o número elementos químicos imprescindíveis para os seres vivos, mas esse valor é bem maior, sendo alguns deles específicos para grupos limitados de organismos vivos. É de salientar que o teor de cada elemento químico nos seres vivos está regulado num intervalo estreito e, além disso, cada um precisa conseguir chegar ao local onde tem a sua função, para serem evitados problemas metabólicos que podem inclusivamente conduzir à morte.

Há muitos aspetos curiosos acerca das particularidades dos elementos químicos nos seres vivos, assim como das suas aplicações inspiradas nos sistemas biológicos. De seguida, serão dados alguns exemplos.

As células têm a particularidade de possuírem no seu interior mais iões potássio, mas menos sódio e cloreto do que no seu exterior (ver Figura 1). Esta situação tem várias consequências, desde o fato de as lágrimas serem salgadas (é bom recordar o poema «Lágrima de Preta» de António Gedeão/Rómulo de Carvalho) por elas serem secreções (e por isso libertam NaCl), assim como, devido à ocorrência desses gradientes de concentração estes estarem na origem de uma diferença de potencial, que dá suporte à transmissão nervosa. É de notar que se estes sistemas envolvendo diferença de potencial estiverem associados em série e se tenham dado algumas modificações adequadas nos tecidos biológicos onde ocorrem, tornam possível para algumas enguias produzirem descargas elétricas, que permite-lhes capturar as suas presas e dissuadir os seus predadores de qualquer ação hostil contra elas.

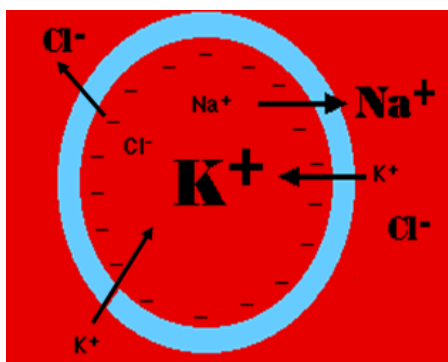


Figura 1. O tamanho relativo dos iões  $K^+$ ,  $Na^+$  e  $Cl^-$  está associado com os seus teores serem maiores ou menores no interior ou no exterior da célula (aqui representada pela circunferência em azul); o sentido das setas representa a tendência para os fluxos comuns para os três iões apresentados, se a célula não for perturbada.

O magnésio é responsável pela cor verde dos legumes e de folhas por estar presente nas clorofilas (refira-se que o étimo de «cloro» é  $\chiλωρος$ , *chloros*, o qual significa verde), cuja importância na formação da biomassa nas plantas e árvores é fundamental para a vida na Terra. É bom lembrar que as árvores de folha caduca no outono reduzem a sua atividade

metabólica e as suas folhas mudam de cor devido aos carotenoides (os quais apresentam cores avermelhadas, alaranjadas ou amareladas) serem progressivamente mais importantes em termos de concentração relativa durante o processo de senescência dessas estruturas biológicas (ver Figura 2). Um outro fato ligado com as clorofilas tem a ver com o modo de cozinhar os legumes verdes e o seu aspeto após este processamento. Caso não esteja regulado o valor do pH, os legumes perdem a sua cor verde viva e têm tendência para ficarem com tons acastanhados. Este fenómeno é devido ao carácter ácido de algumas estruturas celulares, que com o aquecimento em água são degradadas e libertam hidrogénios, os quais ao entrarem em contacto com as clorofilas favorecem nestas a remoção do ião magnésio. Como a competição é com o hidrogénio, o modo de evitar o seu efeito é adicionar bicarbonato de sódio, cujo comportamento como base pode atenuar uma remoção significativa do ião magnésio da clorofila. Refira-se ainda que a cor verde das bananas não maduras deve-se a presença de clorofila, enquanto que a cor amarela aos carotenoides que vão sendo produzidos durante o amadurecimento das bananas.



Figura 2. A cor das folhas é dependente do tipo de pigmentos predominante (ver texto).

O ferro condiciona a cor das hortênsias, as quais são azuis em terrenos mais ácidos e cor de rosa nos mais próximos da neutralidade (ver Figura 3). O motivo deste fenómeno é a menor disponibilidade do ferro nestes últimos terrenos (por este metal formar sais que são mais insolúveis em meio mais básico), o qual está envolvido na síntese das moléculas associadas com a cor azul. Quem desejar flores com esta tonalidade deve tornar o ferro mais disponível no meio, por exemplo, baixando o valor do pH do solo onde se encontram as hortênsias. O mesmo metal participa na orientação magnética de alguns organismos vivos, devido à capacidade de alguns conseguirem produzir estruturas contendo minerais de ferro que são sensíveis ao campo magnético (magnetite,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , ou greigite,  $\text{Fe}_3\text{S}_4$ , sendo a sua ocorrência notável nos seres vivos, dado que na Terra esses minerais se formam geralmente em condições de pressão e temperatura impossíveis para a sobrevivência de qualquer organismo vivo).



(a)

(b)

Figura 3. Hortênsias em meio de maior (a), geralmente mais ácido, e menor (b) disponibilidade de ferro.

Enzimas de cobre estão envolvidas na ocorrência do cabelo escuro, no escurecimento da fruta cortada (ver Figura 4), na produção de belas peças lacadas e esta mesma enzima é aplicada no branqueamento dos *jeans*. Em todos estes casos, o oxigênio molecular é usado na oxidação do substrato que dá aos materiais referidos o aspeto final conhecido.

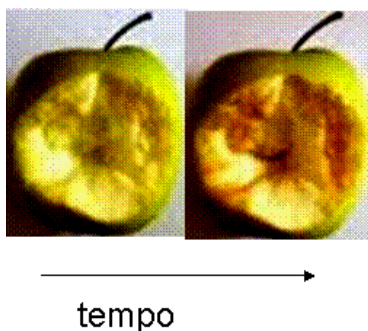


Figura 4. A fruta escurece com o tempo devido à ação da enzima de cobre oxidase do catecol, EC 1.10.3.1.

O níquel pode ser causador de alergias pela sua utilização em acessórios de contacto, tais como, anéis (ver Figura 5) e pulseiras, ou penetrantes da pele (como é o caso dos *piercing*). A razão desta resposta do organismo está associada com o fato deste metal não ser necessário no metabolismo humano, mas pelas secreções do corpo poder ser solubilizado e introduzido nele. Se tal acontecer, pode competir com outros elementos químicos essenciais para a atividade metabólica, mas como o níquel não é o mais apropriado, a sua interferência pode provocar reações alérgicas.



Figura 5. Efeito da alergia provocada por um anel de níquel.



Os biominerais contendo silício, como sílica ( $\text{SiO}_2$ ), ocorrem em diversos seres vivos e apresentam formas muito diversificadas (ver Figura 6). Os fitólitos, como o nome indica são provenientes de plantas, apresentam a característica geral da sílica de uma enorme estabilidade e, adicionalmente, são típicos para as espécies em que ocorrem. Com base nestes pressupostos, quando os fitólitos são descobertos em vestígios arqueológicos permitem revelar características da alimentação dos nossos antepassados. Por outro lado, o conhecimento de como se forma a sílica biológica pode tornar possível aos seres humanos produzi-la em condições equivalentes. É bom lembrar que é um material usado, por exemplo, na fibra ótica, mas enquanto alguns organismos vivos a produzem num grau de pureza elevado e sem recurso a grandes gastos de energia, os seres humanos usam uma tecnologia para a sua purificação que necessita de um dispêndio significativo de energia, sendo necessárias temperaturas muito elevadas.

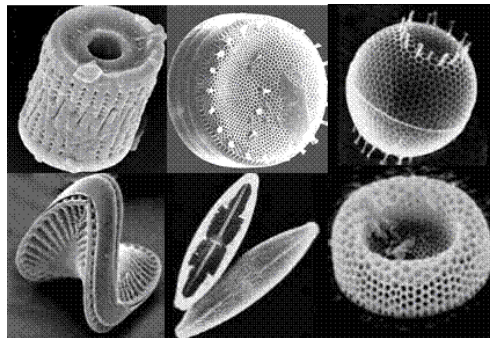


Figura 6. A sílica ocorre no exosqueleto as diatomáceas (organismos unicelulares), tendo essas estruturas tamanhos muito variados entre  $5\ \mu\text{m}$  e  $60\ \mu\text{m}$  e formas distintas; são conhecidas pelo menos uma dezena de milhar de espécies de diatomáceas.

Muitos elementos químicos são empregues em diagnósticos e terapia devido às suas propriedades específicas. Por exemplo, na terapia de alguns tipos de cancro são usados com sucesso compostos de platina. Nas pastas de dentes a presença de ião fluoreto na sua composição reduz a incidência das cárie, dado que o biomineral constituinte básico dos dentes, a hidroxiapatite,  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ , se torna mais resistente à acidez causadora da referida desmineralização, se ocorrer a substituição parcial do ião hidróxido pelo do halogeneto mencionado.

Ao nível da cosmética os cloretos de oxobismuto são usados para darem à pele ou às unhas (ver Figura 7) uma tonalidade pérola. Por outro lado, compostos de selénio ou de zinco são adicionados em champôs para eliminarem a caspa. Infelizmente, é ainda corrente ouvirmos que há champôs sem químicos (pois não só estes produtos corrigem certos problemas,

como mesmo os que são baseados em produtos naturais têm na sua composição também produtos químicos).



Figura 7. Tonalidade pérola dada pelo cloreto de oxobismuto.

A ligação negativa da Química com os fenómenos da poluição é uma abordagem pouco rigorosa, mas infelizmente está muito divulgada. Todavia, é curioso os químicos serem chamados para analisarem e tentarem minorar os efeitos causados após o mal estar feito. Algumas ações preventivas dos efeitos da poluição são hoje correntes e como exemplos, veja-se a importância das estações de tratamentos de esgotos, sendo este tipo de infraestrutura apenas uma maneira como a Química está presente para melhorar a qualidade da água e do ambiente em geral.

Como comentário final refira-se que muitos dos fenómenos apontados como sendo causados pelos químicos ao nível da poluição, devem-se, sobretudo, à ganância pelo lucro fácil, por não terem sido seguidas as condições de segurança que os químicos estariam aptos a sugerir. A Química é uma ciência que pretende, entre outras coisas, conhecer melhor a Vida e não destruí-la.

### ***Bibliografia***

J.J.R. Fraústo da Silva, J.A.L. da Silva, Os Elementos Químicos e a Vida, IST Press, Lisboa, 2011.

## Química nos Oceanos

Ana Maria Almeida Mota

Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

Os constituintes da água do mar interactuam dinamicamente uns com os outros através de processos físico-químicos e biológicos (Figura 1). Os compostos orgânicos naturais presentes na água, nomeadamente aminoácidos, proteínas, lípidos e ácidos húmicos, resultam da excreção e decomposição dos bio-organismos aquáticos.

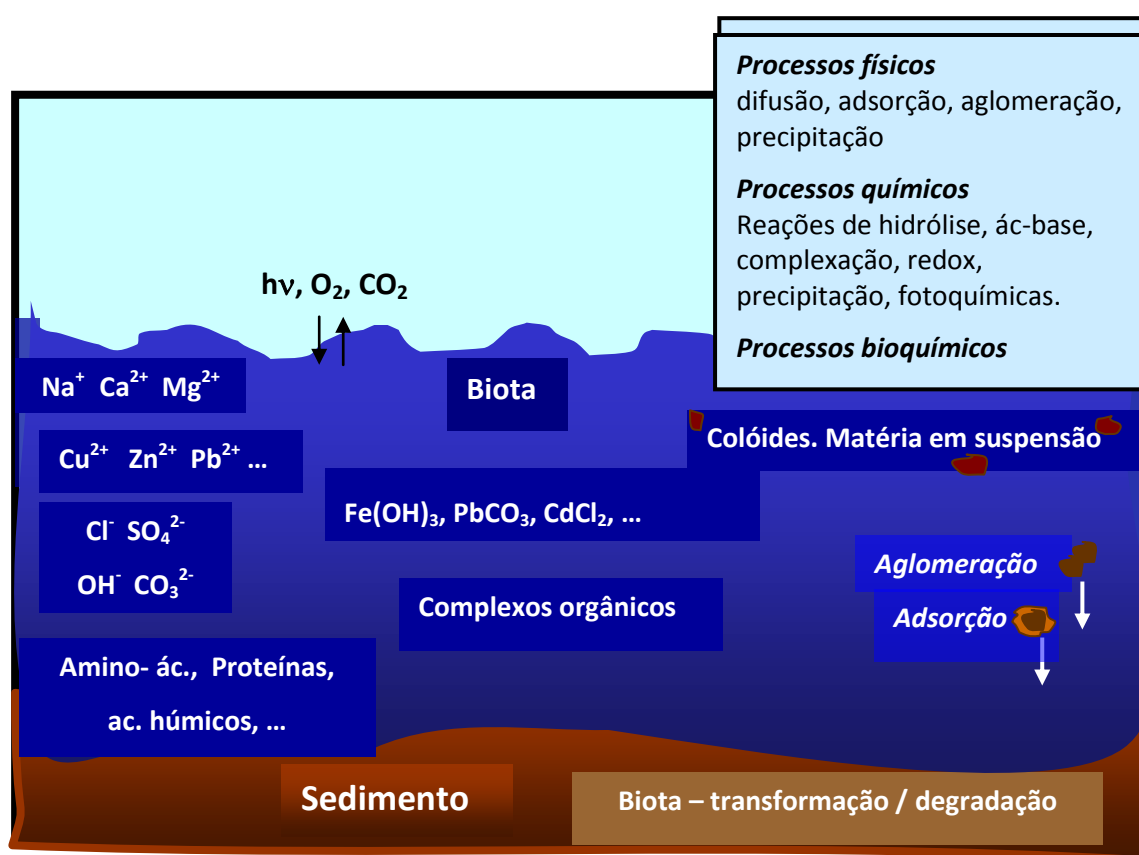


Figura 1 - Interações físico-químicas na água do mar

Vamos agora abordar o papel de algumas destas espécies, a sua biodisponibilidade e sua toxicidade.

### *Iões inorgânicos: qual a sua concentração e qual a sua importância?*

Os elementos maioritários da água do mar, com concentrações da ordem dos  $g \cdot kg^{-1}$ , estão apresentados na figura 2. <sup>(1)</sup> Nestes deve ainda incluir-se o bicarbonato, com 0.4%.

Na outra extremidade do espectro encontram-se os elementos traço, com concentrações inferiores a partes por bilhão (em peso). Dentro destes, alguns são necessários em reações metabólicas, como o caso do cobalto que funciona como ativador de algumas enzimas essenciais e é o elemento central da vitamina B12, enquanto que outros são considerados altamente tóxicos mesmo em concentrações extremamente baixas, como é o caso do mercúrio.

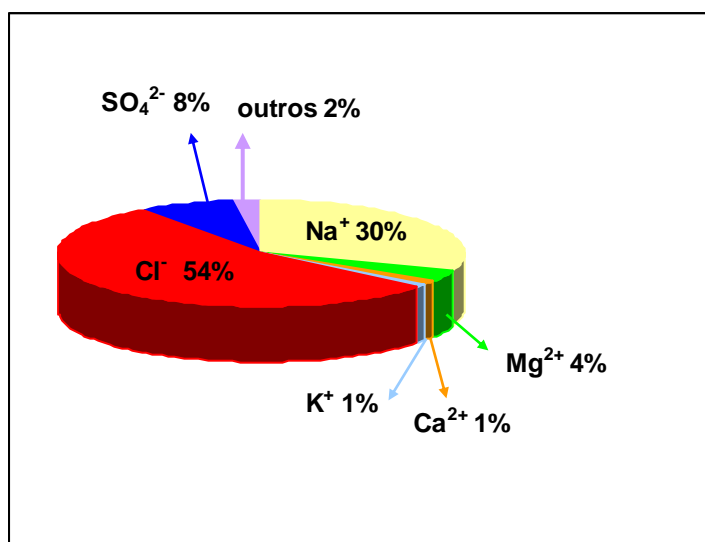


Fig. 2 - Íons majoritários na água do mar.

A % de cada um dos íons foi calculada com base na salinidade de 35‰

Nos oceanos existem aproximadamente 35 gramas de sais dissolvidos por quilograma de água do mar (35‰), o que é uma constante desde há 100 milhões de anos. <sup>(1)</sup> No entanto em mares relativamente fechados e onde desaguam rios com grande caudal essa quantidade pode ser menor, como no caso do mar Báltico com variações de salinidade entre 8 e 34‰ <sup>(2)</sup>, ou maior, em mares fechados com grande evaporação, como no Mar Vermelho ou no Mar Morto, com valores médios de 40 e 300‰ respectivamente <sup>(3,4)</sup>.

É importante conhecerem-se os elementos que existem no oceano pois estes influenciam a vida dos bio-organismos que aí se desenvolvem. Ao falar-se da importância de certos elementos para o biota é no entanto importante ter-se a noção de que a essencialidade e toxicidade de um elemento depende não só do próprio elemento como da sua concentração, da forma química em que ele se encontra e da própria espécie biológica.

Vejamos alguns exemplos:

O sódio, que tem um papel importante no balanço hídrico dos organismos, pode tornar-se letal acima de determinados teores. Assim, quando a quantidade de sal de sódio que o ser humano ingere é maior do que a necessária, o excesso irá produzir uma retenção hídrica aumentando o volume de sangue com consequente aumento da pressão arterial.

O crómio, com teores oscilando entre 0.1 e 0.5 mg.L<sup>-1</sup> na água do mar, apresenta-se principalmente nas formas de Cr(III) e Cr(VI), sendo que Cr(III) é um micronutriente mas Cr(VI) é tóxico e carcinogénico <sup>(5)</sup>.

O mercúrio, que se encontra no oceano na forma de Hg<sup>2+</sup>, constitui uma ameaça à vida aquática devido à sua toxicidade elevada. Esta toxicidade torna-se ainda maior na presença das formas metiladas (CH<sub>3</sub>Hg<sup>+</sup> e (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Hg) por estas serem lipossolúveis <sup>(6)</sup>, favorecidas quando há um incremento da actividade bacteriana nos sedimentos ou um “bloom” de fitoplancton.

### ***Reacção ácido-base: sistema carbonato e sua influência no pH da água do mar***

O anidrido carbónico em contacto com a água forma o ácido carbónico que ao pH da água do mar (cerca de 8.2) se encontra maioritariamente na forma de bicarbonato (HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>). A elevada quantidade de bicarbonato que existe em águas superficiais (0.14 g.kg<sup>-1</sup>) funciona como um tampão às variações de pH, mantendo constante o pH da água do mar. Este aspecto é extremamente importante pois vai condicionar todas as reacções que sejam dependentes do pH.

### ***Reacções de complexação com matéria orgânica: qual a sua importância?***

Em águas oceânicas a matéria orgânica dissolvida (MOD) apresenta uma concentração baixa, entre os 0.3 a 3 mg de carbono por litro, embora em águas costeiras se possam encontrar valores cerca de dez vezes mais elevados, e em sedimentos esta concentração possa atingir os 100 mg.L<sup>-1</sup>. <sup>(5)</sup> Na constituição da MOD podem encontrar-se grupos complexantes, nomeadamente grupos carboxílicos, fenólicos, azotados e com enxofre, para os quais os catiões têm mais ou menos afinidade de acordo com a sua estrutura electrónica. A presença da MOD não afecta a distribuição de catiões maioritários, mas pode afectar muito a forma química de alguns catiões com concentrações baixas (inferiores a 1mg.L<sup>-1</sup>) alterando a sua biodisponibilidade e toxicidade.

Para poder atravessar a membrana biológica um catião complexado tem geralmente que se dissociar primeiro (exceptuam-se compostos lipossolúveis que atravessam directamente a membrana biológica). Se a cinética de dissociação for lenta comparada com a internalização do ião metálico na membrana, então a complexação diminui a biodisponibilidade do catião, e, se ele for tóxico, diminui a sua toxicidade. Isto passa-se por exemplo com alguns catiões na presença da matéria húmica.

### ***Ciclo do ferro e do manganês: qual a sua importância?***

Em águas oceânicas superficiais, muito oxigenadas e a pH cerca de 8.2, o ferro encontra-se na forma de hidróxido de ferro, Fe(OH)<sub>3</sub>. Esta espécie, por ser neutra, encontra-se na forma

particulada e tem tendência a precipitar, transportando com ela as espécies adsorvidas à superfície. No entanto, com o aumento da profundidade, a quantidade de oxigénio diminui promovendo a reacção de redução de Fe(+3) a Fe (+2). Assim a partícula desfaz-se, e as substâncias adsorvidas passam novamente para a solução.<sup>(6)</sup>

Do mesmo modo também o manganês, que à superfície se encontra na forma particulada MnO<sub>2</sub>, é um transportador de substâncias adsorvidas, pois a diminuição de oxigénio com a profundidade promove a redução de Mn(+4) a Mn(+2).<sup>(6)</sup>

Assim o Fe o o Mn são transportadores naturais de espécies desde a superfície até zonas mais profundas, afectando deste modo a composição química da água.

### ***Influência da profundidade na interacção de catiões com o enxofre***

Em águas superficiais, em contacto com o oxigénio atmosférico, o enxofre (S) encontra-se na forma de sulfato, com o estado de oxidação (+6). Em profundidade ele é reduzido a S(-2) devido à falta de O<sub>2</sub>, dando origem à formação de sulfuretos. Como o Hg(+2) e Cd(+2) têm uma grande afinidade para o enxofre, eles encontram-se na forma de sulfuretos em águas profundas, que por terem carga nula precipitam acumulando-se nos sedimentos, enquanto que à superfície estão principalmente na forma livre pois não têm grande afinidade para os carboxilos, grupos complexantes maioritários.<sup>(6)</sup>

O objectivo desta apresentação foi o de exemplificar algumas das reacções químicas que um elemento pode sofrer na água do mar, salientando as diferentes espécies que daí resultam e o impacto que elas têm na mobilidade, biodisponibilidade e toxicidade desse elemento.

### ***Bibliografia***

- 1 – Seawater: its composition, properties and behaviour, Ed. Pergamon Press associated with the Open University Walton Hall, England, 1989
- 2 – F. Janssen, C. Schrum, J.O.Backhaus - A Climatological Data Set of Temperature and Salinity for the Baltic sea and the North Sea, Ocean Dynamics 51, 5-245, 1999
- 3 – R.C. Thunell, S.M. Locke, D.F. Williams, Glacio-eustatic sea-level control on Red Sea salinity, Nature 334, 601-604, 1988
- 4 - The New Encyclopaedia Britannica (15th ed.), Goetz, P.W. (ed.), Vol. 3, p. 937. Chicago, 1986
- 5 – A.M. Mota, M.L.S. Gonçalves - Direct methods of speciation in natural waters, cap.2 do livro "Element Speciation in Bioinorganic Chemistry", Chemical Analysis Series, vol. 135, S. Caroli ed., John Wiley & Sons, 1996.
- 6 – W. Stumm, J.J. Morgan – Aquatic Chemistry: chemical equilibria and rates in natural waters, J. Wiley and Sons (pub.), USA, 1996

## **Experiências no Laboratório**

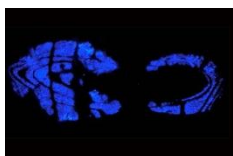
Neste conjunto de experiências interactivas incluem-se actividades que pretendem mostrar, de forma colorida, animada, aromática e sempre com um grande carácter lúdico, aspectos fundamentais da Química como Ciência essencial para explicar o Mundo que nos rodeia bem como a forma desta Ciência ser colocada em acção para desenvolver processos e produtos de interesse prático que utilizamos no nosso quotidiano.

Esperamos que estes Laboratórios Abertos deixem bem marcada a noção de que a Química enquanto Ciência Fundamental, e a Engenharia Química, enquanto a sua aplicação, são as responsáveis por muito do bem estar de que gozamos na Sociedade Moderna, em termos de conforto, mobilidade e saúde, e que podem suportar as soluções que precisamos para um Desenvolvimento Sustentado.

## Química e Crime

Sílvia Chaves

Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal



A química, mais concretamente a *química forense*, pode contribuir de modo decisivo para a resolução de diversas situações que constituem crime, ou seja, uma prática ilegal, que pode tanto envolver um assassinato, um envenenamento ou um roubo, como consistir na adulteração de produtos ou até em práticas de lesão ambiental. A *química forense* é aplicada pela polícia científica em investigação criminal, através da utilização de diversas técnicas de análise química e bioquímica. Os peritos criminais começam por recolher vestígios encontrados na cena do crime (instrumentos de crime, impressões digitais, pegadas, compostos químicos, cadáveres), que devem depois ser conservados até à altura em que serão analisados em laboratório.

Hoje em dia, um laboratório de química forense tanto pode recorrer à química analítica clássica, utilizando testes simples de identificação de determinadas substâncias, como aplicar diversas técnicas instrumentais de análise (qualitativa e quantitativa), tais como cromatografia gasosa (GC), espectrometria de massa (MS), cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC), cromatografia em camada fina (TLC), espectrometria de absorção/emissão atómica (AA/AE), espectroscopia com fonte de plasma induzido (ICP), microscopia electrónica (EM), espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), espectroscopia de ultravioleta/visível (UV-VIS) e electroforese. Actualmente, o exercício de um químico forense está pois dependente quase integralmente da qualidade do equipamento laboratorial disponível e de técnicas avançadas de análise química. Contudo, neste módulo de experiências, serão aplicados apenas testes de análise qualitativa que se baseiam em reacções colorimétricas, sem recorrer a equipamento laboratorial sofisticado.



Este tópico inclui as seguintes experiências:

- Quem disparou a arma?
- Sopra o balão
- Adulteração de alimentos
- Envenenamento por mercúrio

### Quem disparou a arma?

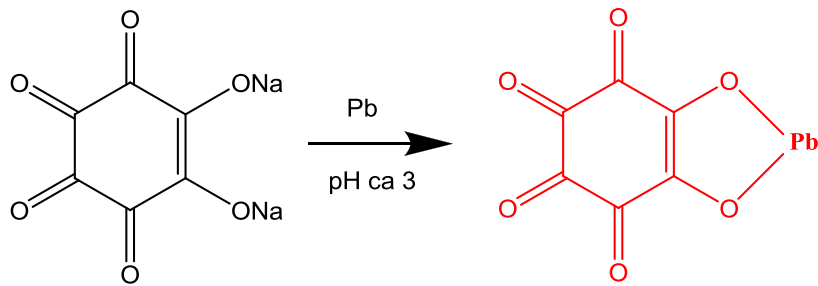
Quando há disparo de armas de fogo, é importante analisar a trajectória e a distância do disparo, de modo a reconstituir a cena do crime. Na balística estuda-se o movimento dos projecteis (trajectória, impacto, marcas, explosão), resultante geralmente da deflagração de armas de fogo, sendo utilizadas técnicas próprias tanto da física como da química.



Utilizando um microscópio balístico, pode ser feita uma comparação entre as marcas deixadas pelos canos e culatras das armas nos projecteis e nas cápsulas, de forma a identificar o fabricante da arma, o modelo e a arma de fogo usada, já que cada arma deixa como que uma “impressão digital” uma vez que produz um determinado conjunto de microestrias.

Claro que uma peça fundamental na reconstituição da cena do crime consiste na identificação do atirador e aí a química pode também dar uma ajuda. Com efeito, no momento do disparo, além do projectil, são expelidos vários produtos gasosos ( $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ , vapor de água, óxidos de azoto), bem como resíduos sólidos contendo antimónio, bário e chumbo, resultantes de explosivos contendo os respectivos sais ou da liga constituinte dos projecteis e cartuchos. Uma parte desses resíduos permanece no interior do cano da arma e em torno do tambor, enquanto o restante é expelido para o exterior, espalhando-se pela cena do crime ou depositando-se nas mãos, braços, cabelos e roupas do criminoso. A análise de resíduos de chumbo deixados por uma arma de fogo é usada correntemente, por este metal ser emitido em maior quantidade, e pode ser feita por um teste colorimétrico em que se usa rodizonato de chumbo.

Em “Quem disparou a arma?” propõe-se a recolha de resíduos de chumbo das luvas do possível “suspeito” usando fita adesiva e fixando a fita numa folha de papel de filtro. Faz-se também uma recolha análoga, após lavagem das luvas com água e secagem com papel. As tiras de fita adesiva, ao serem borrifadas com uma solução de rodizonato de sódio em meio ácido, desenvolvem uma coloração vermelha devido á formação do complexo de rodizonato de chumbo [1].



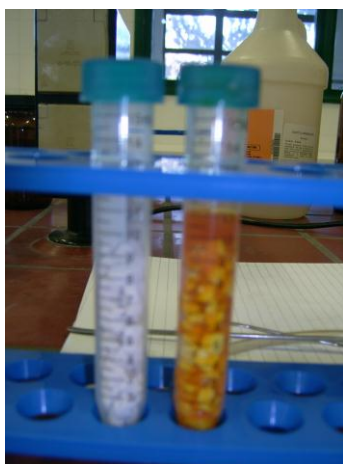
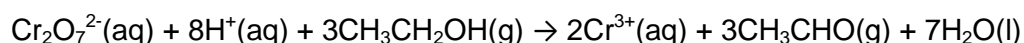
É curioso notar a persistência de permanência dos resíduos de chumbo nas luvas do “suspeito”, mesmo após lavagem e secagem das mesmas, bem como a eficácia deste método identificativo para teores vestigiários.



### Sopra o balão

A ingestão de bebidas alcoólicas é muito antiga (6000 a.C.), revelando a mitologia diversos exemplos em que o álcool aparece como uma substância divina. Talvez esta noção também tenha contribuído para a manutenção do hábito de beber ao longo dos tempos. Se bem que no início o conteúdo em álcool das bebidas fosse baixo, já que bebidas como vinho e cerveja dependem exclusivamente de processos de fermentação, a introdução da destilação, feita pelos árabes na Idade Média, originou o consumo de bebidas destiladas na Europa. Actualmente, Portugal é um dos países em que o consumo de álcool, por habitante, é mais elevado. Devido ao efeito provocado na maioria dos consumidores, estas bebidas são consideradas estimulantes que activam os processos físicos e mentais. A realidade, porém, é bem diferente: o álcool prejudica as capacidades psicofisiológicas e a sua ingestão não moderada acarreta graves danos para a saúde (doenças hepáticas, gastrointestinais e do sistema reprodutivo, aumento do risco de demência e suicídio), além de também poder estar na origem de diferentes problemas financeiros, familiares e sociais e de ser a causa de

vários acidentes de viação. Com efeito, só cerca de 5% do álcool ingerido é eliminado directamente (expiração, saliva, transpiração), enquanto o fígado faz uma eliminação lenta do restante (0,1 g/L por hora) por metabolização do etanol (oxidação através de enzimas específicas  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ ). Isto faz com que as capacidades sensoriais (acuidade visual e auditiva, visão estereoscópica, visão nocturna e crepuscular), perceptivas (tempo de reacção, resistência à fadiga), cognitivas e motoras, inclusive o controlo muscular e o equilíbrio, sejam afectadas, o que interfere na capacidade de conduzir. Por este motivo, está previsto na lei o controlo da taxa de alcoolémia (quantidade de álcool presente no sangue expressa em g/L) dos condutores. O valor máximo da taxa de alcoolémia permitida pelo código da estrada em Portugal é de 0,5 g/L. O valor desta taxa, obtido para um dado indivíduo, depende de vários factores tais como o tipo e quantidade de bebida ingerida, o momento em que foi ingerida (jejum, refeições ou entre refeições), o ritmo de ingestão, o peso e sexo do indivíduo, bem como o seu estado de saúde e/ou de fadiga. Em “Sopra o balão” aprende-se a construir um dispositivo simples [2], capaz de detectar a presença de álcool numa amostra de ar. Essa amostra de ar pode funcionar como o ar expirado por um motorista alcoolizado e a concentração de álcool no ar expirado será proporcional à sua concentração no sangue. O dispositivo é constituído por um balão cheio de ar, no qual se introduziu previamente um pequeno volume de whisky, e que é aplicado à extremidade de um tubo rolhado contendo giz embebido em dicromato de potássio em meio ácido. Na presença do álcool (etanol), dá-se uma reacção redox em que o dicromato (laranja) é reduzido a  $\text{Cr}^{3+}$  (verde) por oxidação do álcool a aldeído.



## Adulteração de alimentos

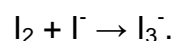
O leite é um alimento concentrado, apto a produzir um rápido desenvolvimento de mamíferos recém-nascidos, se bem que contenha uma elevada percentagem de água na sua composição. Do ponto de vista físico-químico, pode-se dizer que o leite é, simultaneamente, uma solução simples (sais minerais, lactose, ácido láctico, aminoácidos, vitaminas), uma solução coloidal (caseína, albumina), uma emulsão (lípidos) e uma suspensão (células epiteliais, leucócitos). A composição média do leite bovino corresponde a 87% de água, 4,9% de lactose, 3,7% de gordura, 3,5% de proteínas e 0,7% de minerais.

De modo a não causar danos na saúde humana, é importante fazer o controlo de qualidade do leite através da realização de testes específicos tais como determinação da densidade, teor em gordura, acidez e presença de substâncias estranhas. A presença de substâncias estranhas é decorrente de processos de fraude puníveis pela lei, que podem ocorrer desde a fonte de produção até à altura da comercialização, e em que têm sido usadas diferentes tácticas: adição de antibióticos, formol, ácido salicílico ou ácido bórico como conservantes; adição de amido ou urina para reposição da densidade alterada por adição de água; adição de bicarbonato de sódio como corrector de acidez em leite deteriorado,

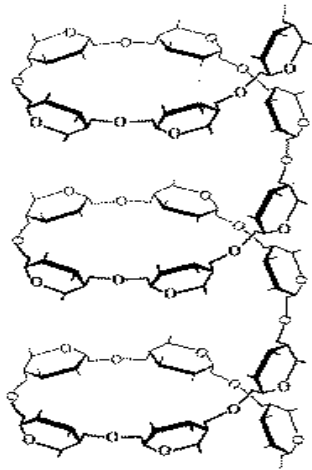
Em “Adulteração de alimentos” são identificadas duas substâncias estranhas em leite previamente contaminado, nomeadamente, amido e ácido bórico.

## Teste para detecção do amido

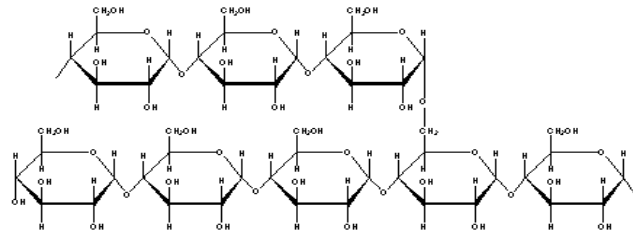
O amido é sintetizado pelas plantas e serve como substância de reserva, uma vez que é uma fonte de glicose. Sendo um produto de origem vegetal, não se deve encontrar no leite, daí que seja uma substância estranha nesse alimento. Na realidade, o amido é uma mistura de dois polissacáridos, a amilose (10-20%) e a amilopectina (80-90%). A amilose é uma macromolécula com 250 - 300 resíduos de D-glucose, possuindo uma estrutura helicoidal. A amilopectina é menos solúvel em água do que a amilose e é constituída por cerca de 1400 resíduos de  $\alpha$ -glucose, possuindo uma estrutura ramificada (ligações  $\alpha$ -1,6). Ao adicionar uma solução de iodo ao amido, na realidade está a adicionar-se o anião triiodeto porque, em solução aquosa tem-se a reacção:



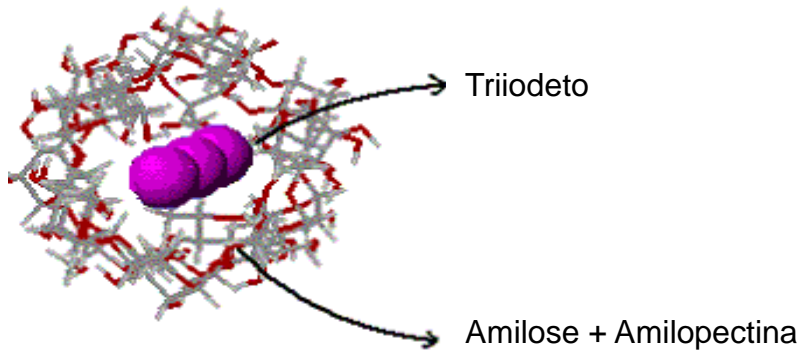
O anião triiodeto fica “aprisionado” no interior das hélices de amilose e aparece uma cor intensa azul acinzentada.



Amilose



Amilopectina

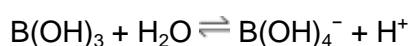
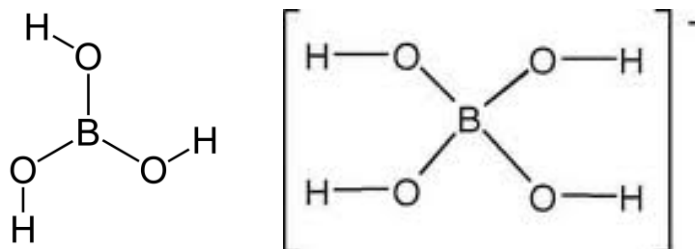


Neste teste são colocadas amostras de leite, sem e com amido, em dois tubos de ensaio. Estes são aquecidos em banho-maria (50-60<sup>0</sup>C) durante breves minutos e, em seguida, é adicionada a mesma quantidade de solução de iodo a ambos os tubos. No tubo que contém a amostra de leite adulterada aparece uma coloração acinzentada, enquanto no da amostra sem amido não se desenvolve cor.

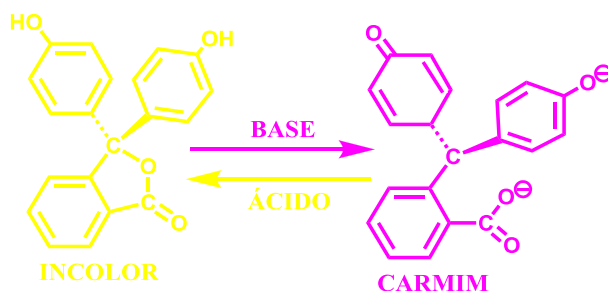


## Teste para detecção do ácido bórico

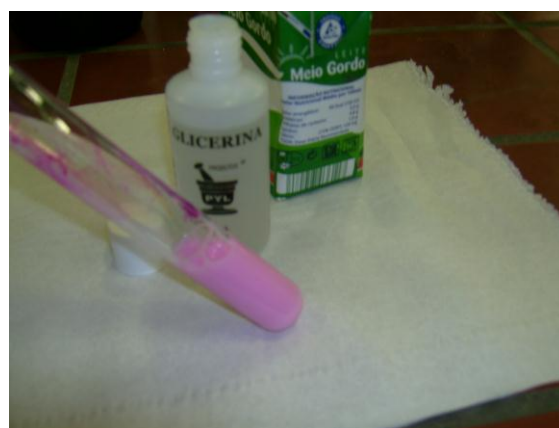
O ácido bórico ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ ), usado frequentemente como anti-séptico, é um ácido fraco em solução aquosa, ou seja, dissocia-se pouco.



Neste teste, começa por se juntar o indicador ácido-base fenolftaleína a dois tubos de ensaio contendo leite, com e sem ácido bórico. Em seguida, adiciona-se a ambos os tubos uma solução de base até surgir a cor básica da fenolftaleína (rosa). Finalmente, acrescenta-se glicerina ( $\text{OHCH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$ ) e observa-se o desaparecimento da cor rosa no tubo que contém o leite adulterado com ácido bórico.



O desaparecimento desta cor significa que apareceu a forma ácida da fenolftaleína (incolor) devido à dissociação do ácido bórico que apresenta um grau de ionização maior em glicerina [3]. Provavelmente, a glicerina esterifica o ácido bórico, sendo a espécie resultante um ácido mais forte do que o ácido bórico.



## Envenenamento por mercúrio

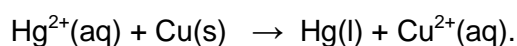
Durante vários séculos o envenenamento foi utilizado como forma de assassinio: desde a Grécia (Sócrates foi condenado à morte por envenenamento) e a Roma Antiga até à Renascença, em que o envenenamento se tornou uma forma de arte, sendo desenvolvidas formas subtis de administração (anéis, espadas, punhais, cartas e bâtons).

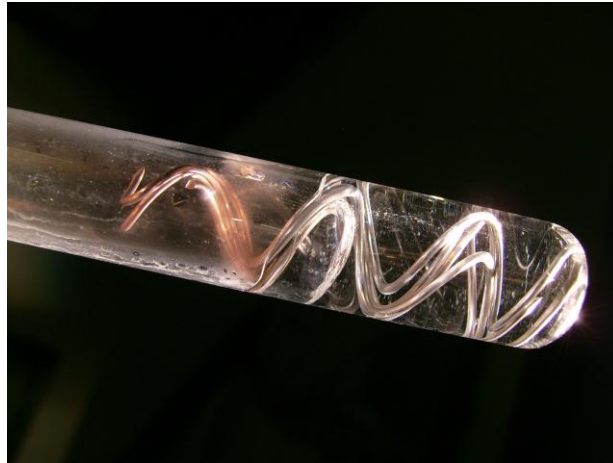


A razão de ser desta escolha pelos assassinos resulta provavelmente do facto de os venenos serem fáceis de adquirir (várias substâncias naturais podem ser tóxicas a partir de determinada dose ingerida) e de muitos envenenamentos apresentarem sintomas semelhantes aos de várias doenças comuns, o que levava os médicos a decretar uma causa de morte natural para as vítimas. O primeiro julgamento em que foram utilizados como provas pareceres toxicológicos de médicos (meros testes sensoriais) ocorreu em Inglaterra, em 1752, e dizia respeito a um caso de assassinato por envenenamento gradual com arsénio. No entanto, só em 1787 se descobriu um teste de identificação do arsénio (por aquecimento com carvão e formação de um depósito do tipo vidro negro) e apenas em 1911 surgiu o primeiro método quantitativo de determinação de arsénio no corpo humano e no solo (para dosear arsénio no solo dos cemitérios e determinar a altura da contaminação do corpo - *in vivo* ou *post mortem*).

Quando há suspeita de morte por envenenamento está-se dentro do domínio da toxicologia forense. A polícia científica pode começar por utilizar um teste qualitativo extremamente sensível e rápido como o teste de Reinsch, muito útil numa primeira fase de despiste da presença de metais tais como arsénio, antimónio, bismuto ou mercúrio presentes em urina, preparados gástricos ou resíduos provenientes da cena do crime. Adolf Reinsch (1862-1916) foi um professor alemão que esteve envolvido na análise bacteriológica e química da água fornecida em Altona (hoje parte de Hamburgo). No teste de Reinsch basta introduzir na amostra uma pequena porção de fio de cobre, acidificar e verificar a cor do depósito formado sobre o fio de cobre (preto para arsénio, cor de prata para mercúrio, púrpura escuro para antimónio).

Em “Envenenamento por mercúrio” verifica-se o aparecimento de mercúrio metálico (cor de prata) sobre um fio de cobre mergulhado num preparado gástrico artificial. Dá-se uma reacção redox, em que os iões mercúrio em solução aquosa se reduzem a Hg(l) enquanto o cobre metálico passa à solução sob a forma de iões Cu<sup>2+</sup>:





### ***Bibliografia***

- 1 M.R. Bartsch, H.J. Kobus, K.P. Wainwright, "Un update on the use of the sodium rhodizonate test for the detection of lead originating from firearm discharges", J. For. Sci. 41 (1996) 1046-1051.
- 2 K.J. Dombrink, "A commercial device involving the breathalyzer test reaction", J. Chem. Ed. 73 (1996) 135-136.
- 3 J.C. Krantz, Jr, C.J. Carr, "A note on the titration of boric acid", J. Am. Pharm. Assoc. 21 (1932) 350-353.



### Química em Movimento

Sandra Silva<sup>a</sup>, Sara Pedro<sup>a</sup>, Francisco Lemos<sup>b</sup>, Maria Amélia Lemos<sup>b</sup>, Filipe Freire<sup>b</sup>, Anabela Coelho<sup>b</sup>, Fátima Coelho<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Alunos do Mestrado Integrado em Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

<sup>b</sup> Centro de Engenharia Biológica e Química, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

<sup>c</sup> Centro de Processos Químicos, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

Quando pensamos em movimento o que nos vem à ideia são forças mecânicas em acção. Na realidade, a física ensina-nos que para produzir movimento temos que ter forças a actuar sobre os objectos. O que nem sempre é evidente, se bem que em muitos casos seja verdade, é que aquilo que está por trás da maioria dos movimentos que vemos à nossa volta, e aqueles que nós produzimos todos os dias, é a química.

Neste módulo vamos tentar mostrar-te como a química, através de várias reacções, é na realidade a responsável por muitos dos movimentos que utilizamos no dia a dia.

### **O Automóvel**

Vamos começar por um caso que é claramente ligado à Química - o automóvel. O que faz movimentar um automóvel é um motor de explosão interna. Neste motor, utiliza-se de forma controlada uma reacção química descontrolada, explosiva, para impulsionar o automóvel. O que se passa num motor de explosão interna é que os cilindros do automóvel são, à vez, carregados com uma mistura de ar e combustível (a gasolina), mistura essa que é incendiada na altura adequada. A reacção de combustão que é originada liberta uma grande quantidade de energia que provoca uma expansão dos gases gerados pela combustão (essencialmente dióxido de carbono e água) fazendo deslocar os pistões e originando o movimento do automóvel. Se considerarmos um motor de 6 cilindros a trabalhar a um regime de 3000 rotações por minuto, o automóvel é impulsionado por 18000 explosões por minuto – é muita química.

É certo que este modo de locomoção está a ser apontado como um dos responsáveis pelo aquecimento global, ao produzir grandes quantidades de CO<sub>2</sub>; sendo certo que este efeito é,

efectivamente, prejudicial para o clima, ninguém imagina o Mundo moderno sem os meios de transporte e a solução deste problema vai, mais uma vez, recair na área da Química, quer através do desenvolvimento de meios de reciclar o CO<sub>2</sub> produzido, quer obtendo alternativas de levar a energia aos veículos.

Uma das alternativas que aparece frequentemente mencionada é a utilização de veículos eléctricos, que não produzem emissões de CO<sub>2</sub>. Vamos colocar de lado aqui, porque é um assunto diferente, a discussão de como é gerada a energia eléctrica que vai alimentar os veículos. Ninguém imagina um veículo eléctrico com um fio muito comprido para o ligar à fonte de alimentação mais próxima – um veículo eléctrico necessita de uma fonte portátil de corrente eléctrica – uma bateria. As baterias são, na realidade, reactores electroquímicos onde reacções de oxidação/redução dão origem a um fluxo de electrões que é capaz de fornecer a energia necessária.

### **Aviões, Foguetões e outros Veículos**

A Química é também a responsável pelo movimento de todos os outros objectos que se deslocam a alta velocidade. Os aviões são também movidos pela reacção de combustão do combustível no ar atmosférico. Os foguetões são também exclusivamente impulsionados por motores químicos – apesar de haver uma intensa pesquisa para se desenvolverem formas alternativas de impulsionar naves espaciais, neste momento somente a energia gerada pelas reacções químicas de combustão é capaz de gerar as enormes forças necessárias para colocar um Space Shuttle no espaço. Os foguetões, que se deslocam até fora da atmosfera da Terra são forçados a levar no seu interior não só o combustível (frequentemente hidrogénio – o Space Shuttle gasta mais de 1300 L/s só no motor principal), mas também o comburente necessário – o oxigénio. Para elevar objectos como o Space Shuttle

são utilizadas reacções químicas que libertam ainda maiores quantidades de energia do que a combustão do hidrogénio com oxigénio. Mais de 80 % do impulso para descolagem do Space Shuttle era gerada por dois motores de combustível sólido (cada um com cerca de 450 toneladas de mistura impulsionadora) que utilizavam perclorato de amónio (comburente), alumínio (combustível) e óxido de ferro (catalisador).

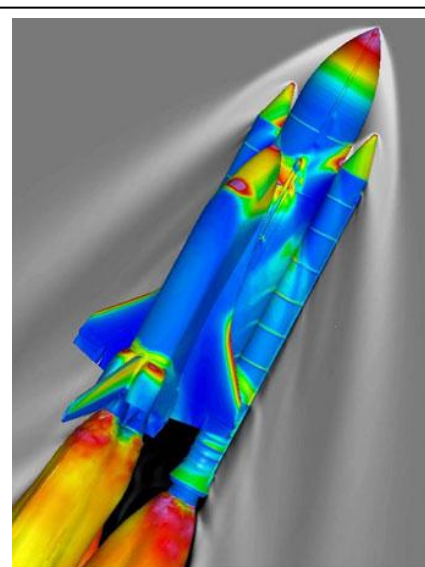


Imagem representando o fluxo de ar em torno de um Space Shuttle e as pressões produzidas num voo a Mach 2.46 e a 20000 metros de altitude (fonte: NASA - <http://www.nas.nasa.gov/Resources/Applications/applications.html>)

### **O Corpo Humano como Reactor Químico**

Mas não são só estes objectos que são movidos pela Química. Na realidade todos os seres vivos são movidos por reacções químicas. O corpo humano recebe energia dos alimentos que ingere, em particular dos hidratos de carbono e das gorduras, e armazena-a sob a forma de compostos químicos, como o ATP (adenosinatrifosfato). O movimento dos nossos músculos é também originado por cadeias de reacções químicas que produzem a energia necessária ao movimento.

Neste módulo vais encontrar modelos de automóveis movidos por diferentes formas de energia química, um carrinho a combustível líquido, um movido a baterias, um movido por uma célula fotoelétrica e um outro movido pela energia armazenada num elastómero – um carrinho movido por um elástico.

### **O Petróleo**

Sem a sua existência e mais especificamente o conhecimento das propriedades combustíveis do petróleo e muitos dos seus derivados, não teria sido possível ao engenheiro alemão K. Benz o desenvolvimento do primeiro automóvel com motor de combustão interna a gasolina.

O petróleo é essencialmente constituído por hidrocarbonetos e encontra-se na natureza impregnando rochas sedimentares como os arenitos, as quais, devido à sua permeabilidade, permitem que o petróleo migre para o interior da crosta terrestre. Se este movimento for interrompido por uma camada de rochas impermeáveis, tem tendência a acumular-se, formando as denominadas jazidas. Refira-se que este processo pode verificar-se não só na superfície terrestre - “on-shore”-, mas também no fundo do mar, ou “off-shore”. Das jazidas “on-shore” conhecidas, as mais importantes estão no Médio Oriente

(sendo a Arábia Saudita o primeiro produtor mundial), Rússia e repúblicas do Cáucaso, Estados Unidos e América Central. Mais recentes, são bem conhecidas as descobertas “off-shore” de Angola, México e ainda mais recentemente o Brasil e Moçambique. O primeiro “poço” de petróleo com exploração comercial foi perfurado nos Estados Unidos, na Pensilvânia em 1859. Na figura mostra-se uma plataforma de extração de petróleo em Oklahoma, nos Estados Unidos, em 1922.

O petróleo normalmente só pode ser utilizado como combustível após a sua refinação, que consiste essencialmente em separar a complexa mistura de hidrocarbonetos que o

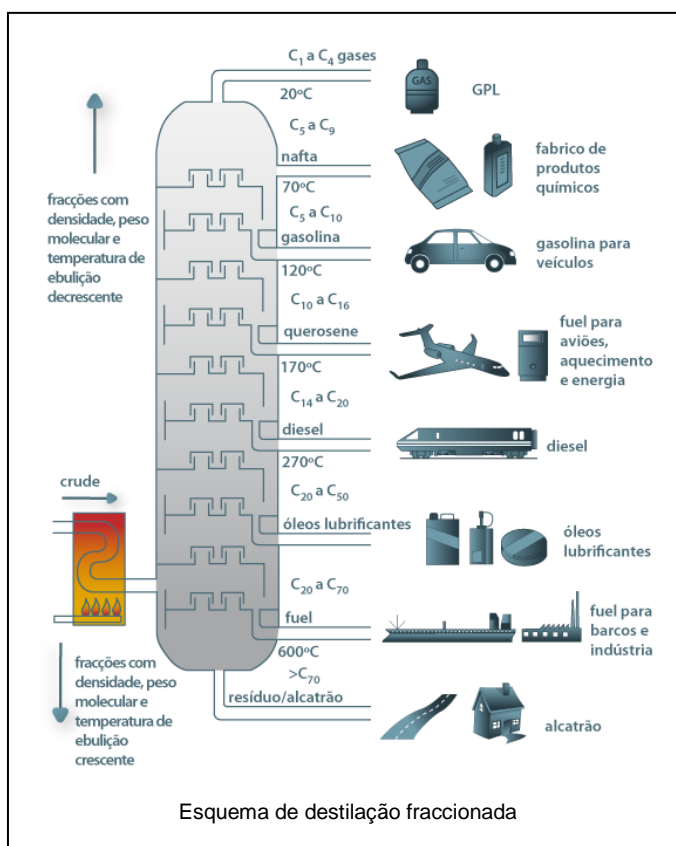


Plataforma de extração de petróleo em Oklahoma nos Estados Unidos, 1922.

constituem. O processo utilizado consiste numa sucessão de operações de destilação fraccionada e de cracking.

A primeira etapa da refinação consiste resumidamente em aquecer o petróleo bruto e conduzi-lo à parte inferior de uma torre de fraccionamento, denominada coluna de destilação. No seu interior, a coluna de destilação dispõe de uma série de pratos colocados a diferentes alturas.

Os componentes mais voláteis (substâncias mais leves), de mais baixo ponto de ebulição, sobem continuamente pela coluna em direcção ao seu topo, que é a parte mais fria, até condensarem. Os componentes de elevado ponto de ebulição condensam-se em diferentes alturas da coluna e refluem para baixo.



Desta forma, consegue-se que a uma determinada altura da coluna, a temperatura permaneça constante, e que o líquido condensado em cada prato tenha sempre a mesma composição química. A esses produtos de composição química definida chamam-se fracções, sendo as principais as constituídas por gás, gasolina, querosene, gasóleo.

Na base da coluna de fraccionamento, onde a temperatura é mais elevada, fica um resíduo que ainda contém fracções voláteis. Para a sua recuperação há que submeter o resíduo a temperaturas ainda mais elevadas, levando à sua decomposição. Por isso, para que a destilação prossiga, o resíduo é transportado por meio de bombas para outra coluna, onde, sob uma pressão reduzida próxima do vácuo (diminuindo a pressão diminui a temperatura de ebulição), continua em ebulição a uma temperatura mais baixa, não destrutiva, e as fracções vaporizam-se. Esta destilação adicional decompõe o resíduo em óleo diesel ("fuel-oil"), óleo lubrificante, asfalto e cera parafínica.

Para a obtenção de maior número e variedade de produtos, as fracções mais pesadas podem ainda ser "partidas" em fracções mais leves pelo processo designado de Cracking. Este processo consiste essencialmente em decompor pelo calor e/ou por uso de um catalisador, as moléculas grandes das substâncias pesadas, cujo ponto de ebulição é elevado, para obter moléculas de tamanho menor e que correspondem a substâncias mais

voláteis, logo com ponto de ebulição mais baixo. Deste modo, por exemplo, o fuel-oil (óleo combustível pesado) pode ser convertido em gasolina.

Na figura mostra de forma esquemática o que é a destilação fraccionada do petróleo e como os subprodutos mais importantes vão sendo obtidos a partir do aumento de temperatura.

### ***O Biodiesel***

Ao longo da história a ciência e a tecnologia têm estado em constante movimento. Quando se fala de ciência na Idade Média são inevitáveis as referências à Alquimia. À luz dos conhecimentos actuais compreende-se a relutância em classificar as suas práticas, para além dos objectivos, como verdadeira Ciência. Contudo, não é menos certo que também a alquimia deu também o seu contributo à ciência, nomeadamente à química.

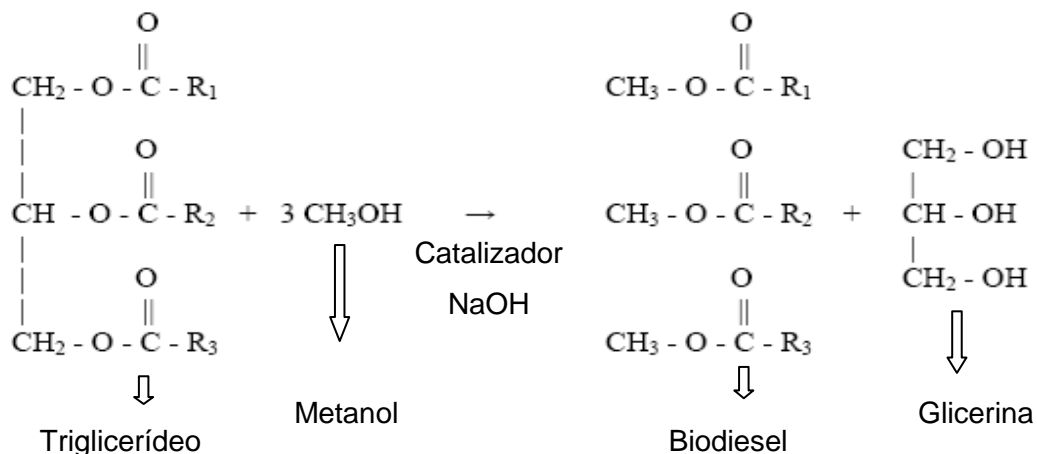
O desenvolvimento da ciência e tecnologia deve idealmente conduzir a caminhos de desenvolvimento seguros e sustentáveis, também do ponto de vista ambiental. Junto com a crise energética, a crescente preocupação com a poluição ambiental tem estimulado a procura de fontes de energia alternativas.

A natureza finita das formas de energia mais tradicionais, de que o petróleo é talvez o exemplo maior, torna cada vez mais urgente a procura de formas de energia alternativas. A Natureza apresenta-nos muitos outros recursos, muitos deles virtualmente inesgotáveis (o vento, o sol, as ondas...) que podem e devem ser aproveitados. Uns mais económicos, outros menos poluentes, são muitas as vantagens que estes novos tipos de Energia nos oferecem.

As várias “crises” do petróleo dos últimos anos, traduzindo, entre outras razões, também a perspectiva do seu esgotamento a prazo, foram sem dúvida um forte estímulo para a procura e desenvolvimento de fontes de energia alternativas. É neste contexto que surgem os chamados biocombustíveis, destacando-se as vantagens sociais e ambientais comparativamente aos combustíveis de origem fóssil. O chamado “biodiesel” é um exemplo marcante. O Biodiesel, por ser biodegradável, pouco tóxico e com baixa concentração de substâncias aromáticas potencialmente cancerígenas, recebe o título de “combustível ecológico”. As oleaginosas são o principal grupo de culturas usadas como matérias-primas possíveis para a obtenção do produto: soja, colza, girassol. O milho é outra matéria-prima já em utilização.

O Biodiesel pode ser obtido através de uma reacção de transesterificação de triglicéridos, de óleos e/ou gorduras vegetais ou animais, com um álcool de cadeia pequena, resultando como produtos da reacção o alquil-éster (biodiesel) e glicerol, como se mostra na figura. Dos álcoois de cadeia pequena o metanol é o mais utilizado. A reacção de transesterificação é realizada na presença de catalisadores ácidos, básicos ou enzimáticos. A glicerina é

separada do biodiesel o qual será lavado com água para neutralizar o catalizador e atingir um determinado grau de purificação, exigido por lei para utilização como combustível alternativo para os motores diesel.



Reacção de transesterificação

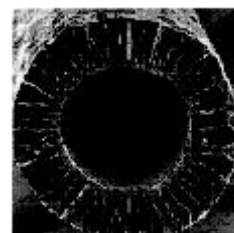
A escolha do catalisador, razão molar de óleo/álcool, tempo de reação, temperatura e velocidade de agitação são variáveis que podem influenciar na reação de transesterificação e cuja otimização se torna necessária para a obtenção de um biodiesel de qualidade.

### Ultrafiltração

Os avanços da Ciência e da Tecnologia nem sempre se devem a descobertas extraordinárias no campo dos materiais ou das suas utilizações. Novos processos ou mecanismos são certamente uma fonte igualmente importante nesta procura incessante e interminável que tem caracterizado a Humanidade desde sempre.

A filtração por membrana é uma das modernas tecnologias utilizadas para a clarificação, concentração e separação de componentes, dessalinização e purificação de uma grande variedade de bebidas. É também aplicada com o objectivo de melhorar a segurança alimentar de muitos produtos, pois reduz a contaminação microbiana e elimina substâncias indesejáveis, dispensando assim o recurso a tratamentos mais invasivos, nomeadamente térmicos.

Esta técnica utiliza uma barreira física sob a forma de membrana porosa ou filtro para separar as partículas num fluido, como pode ver-se na figura ao lado. Estas partículas são separadas com base no seu tamanho e forma, utilizando o efeito da pressão e membranas especialmente



Membrana de ultrafiltração

desenhadas para o efeito, com poros de diferentes diâmetros.

Embora haja diferentes métodos de filtração por membrana (osmose inversa, nanofiltração, ultrafiltração e microfiltração, em ordem crescente relativamente ao diâmetro dos poros da membrana), todos eles visam a separação ou concentração de substâncias num líquido.

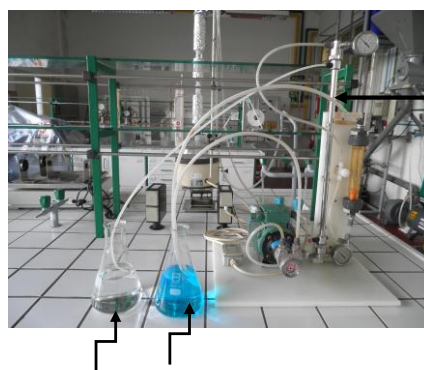
A ultrafiltração é um processo intermédio no que refere ao tamanho dos poros, retendo tipicamente moléculas com massa molar entre 500 e 500 000 Daltons.

A ultrafiltração do leite representa a primeira verdadeira inovação na história da confecção do queijo, oferecendo vantagens consideráveis<sup>1,2</sup>. Durante o processo de fabrico de queijo, alguns dos nutrientes presentes no leite são perdidos no soro (hidratos de carbono, vitaminas solúveis e minerais). A ultrafiltração revelou-se um meio eficaz para recuperar estes subprodutos, que podem ser utilizados posteriormente para desenvolver outros produtos alimentares.

Também no tratamento de efluentes a aplicação da técnica de ultrafiltração tem sido amplamente utilizada, não só evitando contaminações de diversa ordem, nomeadamente ambientais, mas também com o objectivo de recuperação de compostos presentes na corrente descarregada, para possível reutilização.

As águas residuais da indústria têxtil, dado o alto teor de corantes que normalmente apresentam, proporcionam um exemplo representativo. Muitos destes efluentes e seus subprodutos, para além da toxicidade para o Homem, podem também, sem o devido tratamento, ser altamente prejudiciais para a fauna e flora aquáticas. A eliminação ou diminuição destes impactos para níveis seguros, permitindo a reutilização da água, tornam estes processos de separação com membranas de grande utilidade.

Na ultrafiltração, a força que promove o transporte é a pressão que actua sobre a solução de alimentação, fazendo-a passar tangencialmente sobre a membrana de ultrafiltração. As macromoléculas são retidas enquanto o solvente passa livremente. A solução de alimentação dá origem a duas correntes, sendo uma designada por rejeitado, constituída pelos solutos que ficam retidos na membrana e outra, designada por permeado, que é constituída pelo solvente, como pode ver-se na foto seguinte de uma mini instalação piloto.



Suporte com membrana de ultrafiltração

Permeado    Solução de alimentação

## Levado pelo Vento

Vasco Manaças<sup>a</sup>, Francisco Lemos<sup>b</sup>, Maria Amélia Lemos<sup>b</sup>, Filipe Freire<sup>b</sup>, Fátima Coelho<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Aluno do Mestrado Integrado em Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

<sup>b</sup> Centro de Engenharia Biológica e Química, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

<sup>c</sup> Centro de Processos Químicos, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

O atrito é uma força bem conhecida que está presente em todos os movimentos que fazemos ou provocamos no nosso dia-a-dia. Quando lançamos uma bola a rolar pelo chão vemos que o seu movimento é retardado e que ela acaba por parar, precisamente devido ao atrito que se gera entre a bola e o chão e entre a bola e o ar; também é o atrito que sentimos se colocarmos um objecto fora da janela de um automóvel em movimento – o atrito que se gera entre o automóvel e o ar é uma das principais força que se opõe ao movimento do automóvel e provoca consumo de energia. Assim, o atrito é usualmente considerado uma força essencialmente “negativa”, e dissipativa, algo que se opõe ao movimento do corpos e que nos faz consumir mais energia para os movimentos.

No entanto, a existência do atrito não é inteiramente negativa e há muitas acções que, na realidade, só são possíveis devido ao atrito.

Já falámos do atrito entre um automóvel e o ar e como ele aumenta o consumo de energia mas deve também dizer-se que se o automóvel se desloca isso se deve ao atrito. É o atrito entre os pneus do automóvel e a estrada que faz com que o automóvel se mova quando o motor faz girar as rodas; caso não houvesse atrito as rodas limitavam-se a girar sobre o pavimento e não se produziria qualquer movimento de deslocação. O atrito é também essencial nas viragens e travagens – sem ele seria muito mais complicado controlar o movimento do automóvel.

É ainda o atrito que permite aos pára-quedistas chegar ao solo a uma velocidade aceitável. Sem as forças de atrito do ar no pára-quedas, as quedas seriam movimentos uniformemente acelerados e a velocidade na chegada ao solo seria muito mais elevada.

O atrito tem também muitas utilizações na indústria química e é utilizado em muitos processos que têm um enorme impacto na nossa vida quotidiana.

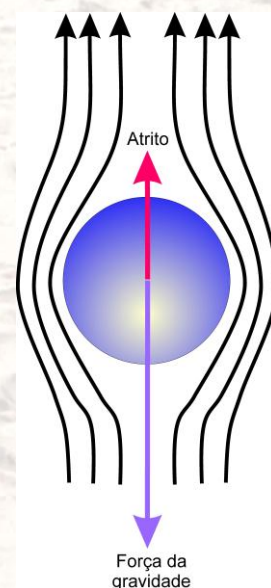
### ***A Queda de Objectos em Fluidos***

Vamos considerar o caso de um objecto que é largado verticalmente no ar. À medida que o objecto é acelerado pela gravidade ele tem também de “abrir caminho” através do ar,

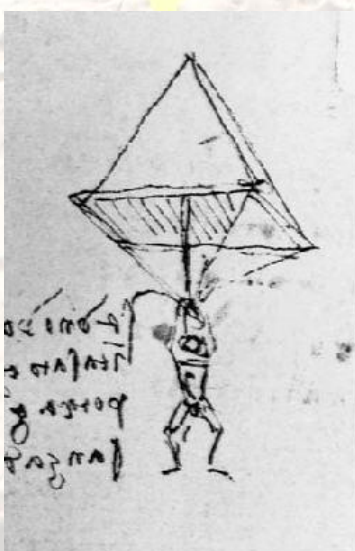


“empurrando” as moléculas de ar para o lado, gerando um fluxo em torno do objecto. Este processo gera uma força que se opõe ao movimento do objecto, força esta que, por motivos mais ou menos evidentes, vai aumentar rapidamente com a velocidade a que o objecto se desloca. Assim, o movimento descendente do objecto através do ar é acelerado por uma força que resulta da composição da força da gravidade e da resistência oferecida pelo ar (ver figura).

No início do movimento o objecto é acelerado pela força da gravidade mas, à medida que o objecto aumenta a sua velocidade, a força que se opõe ao movimento do objecto vai também aumentando; sendo uma força de sinal contrário à da gravidade, a força líquida que acelera o objecto vai-se reduzindo. Eventualmente a força de resistência ao movimento iguala, em intensidade, a força da gravidade, resultando um força líquida nula, o que significa que o movimento passa a ser uniforme e não acelerado; diz-se



que foi atingida a velocidade terminal do objecto no ar. A título de exemplo podemos indicar que a velocidade terminal de um ser humano em queda livre (sem pára-quedas) com o corpo posicionado na horizontal (posição em que oferece uma maior resistência ao ar, é de cerca de 200 km/h enquanto que na vertical pode atingir velocidades na ordem dos 300 km/h. O facto de se abrir um pára-quedas e aumentar a resistência ao movimento vai reduzir a velocidade de queda, como Leonardo Da Vinci já tinha imaginado, e permitir ao pára-quedista atingir o solo a velocidades razoáveis, da ordem dos 20 km/h com um pára-quedas moderno (não com a versão de Leonardo Da Vinci).



### ***O Transporte Pneumático***

Se o atrito faz com que um objecto caia mais devagar num fluido também permite que, utilizando um fluido, possamos fazer movimentar um objecto, mesmo na vertical. Todos já sentimos a sensação de ser “levados pelo vento” quando este sopra com força. Na realidade, se considerarmos que a velocidade terminal de um ser humano no ar é de cerca de 200 km/h, podemos perceber que se houvesse um vento vertical de 200 km/h um ser humano poderia ficar suspenso no ar. Na realidade não é costume haver ventos verticais de 200 km/h mas este efeito é utilizado em túneis de vento verticais para efeitos recreativos, o “indoor skydiving”.

### ***O Atrito na Engenharia Química***

A Engenharia Química usa também este efeito com grande frequência. Podemos dizer que todos os dias utilizamos produtos que foram fabricados em equipamentos que recorrem à utilização do atrito em partículas; na realidade é difícil não o fazer dado que este efeito é utilizado nos reactores químicos que produzem a gasolina que utilizamos nos automóveis diariamente.

Depois de termos falado do que acontece a uma partícula no seio de um fluido vamos pensar no que acontece a um conjunto de partículas pequenas que está a ser atravessado, na vertical e no sentido ascendente, por um fluido, como o ar ou a água. O leito de partículas está inicialmente compactado pela própria gravidade e as partículas comprimem-se umas contra as outras. Quando iniciamos o fluxo do fluido as partículas oferecem uma resistência importante ao fluido, também devido ao atrito. À medida que aumentamos a velocidade do fluido as forças de atrito entre o fluido e as partículas vão aumentando; dado que o fluxo do fluido é vertical esta força vai-se opor à força da gravidade e, a partir de certa altura, será suficiente para a compensar, não só para cada uma das partículas individualmente, mas também para o leito na sua totalidade. Nesse instante, que corresponde à situação em que a velocidade das partículas em relação ao fluido é igual à velocidade terminal destas, as partículas ficam suspensas no seio do fluido e deixam de ter contacto umas com as outras. O resultado é uma suspensão de partículas no seio do fluido e o leito de partículas que inicialmente tinha um aspecto sólido passou, ele próprio, a comportar-se como um fluido, sendo então designado por “leito fluidizado”.

Há duas principais consequências deste fenómeno – por um lado, o contacto entre o fluido e as partículas é muito grande, o que é muito importante quando queremos, por exemplo, promover uma reacção entre um componente do fluido e um componente do sólido, e, por outro, é muito fácil movimentar as partículas – na realidade se aumentarmos um pouco mais a velocidade de passagem do fluido através do leito é possível fazer com que as partículas se desloquem na mesma direcção que o fluido, ocorrendo “transporte pneumático”.

## Orgânica a Todo o Vapor

Dulce Elisabete Bornes Teixeira Pereira Simão

Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa.

### Luz, Cor e Ação

A Química Orgânica é a química dos compostos de carbono e é a base de toda a vida na terra. O átomo de carbono tem uma extraordinária capacidade de constituir cadeias mais ou menos longas e de simultaneamente estabelecer ligações com vários elementos, como o oxigénio, o enxofre, o azoto, o fósforo e os halogénios, entre outros. Existe por esta razão uma enorme variedade de compostos orgânicos. Estes podem ser obtidos a partir de produtos naturais por extração, ou a partir de outros produtos químicos por reação, conhecida como síntese orgânica. A síntese orgânica tem como objectivo a obtenção de novas moléculas, úteis no desenvolvimento de novos materiais, fármacos e outras moléculas biologicamente activas. Neste módulo pretendem-se mostrar várias técnicas de isolamento de compostos orgânicos a partir de produtos naturais e fazer a preparação de dois compostos por reação, onde a luz, cor e ação estão sempre presentes e ilustram o trabalho usual num laboratório de Química Orgânica.

Este tópico inclui as seguintes experiências:

### Destilação por arrastamento de vapor

Esta técnica é muito utilizada para isolar compostos orgânicos de produtos naturais. Neste tipo de destilação produz-se vapor de água numa caldeira que depois é introduzido na montagem. Esta destilação só se pode fazer quando o componente que queremos isolar não é solúvel em água. Nesta experiência, mostramos como, através deste método podemos isolar o limoneno, o principal constituinte do óleo de laranja (Sumol), um produto da indústria de sumos. Este composto orgânico é constituído por átomos de carbono e hidrogénio.

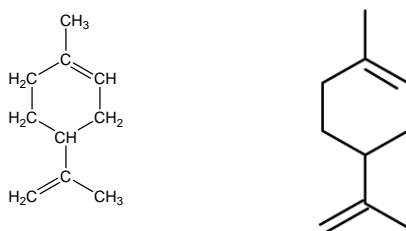


Figura 1 – Duas fórmulas de estrutura química do limoneno.

É obtido por extração mecânica da casca de laranja e é usado como aromatizante nas indústrias farmacêutica, de cosmética e alimentar. O óleo de laranja contém 95% de limoneno, e outros compostos, num total de cerca de 30 constituintes.



Figura 2 – Laranjas e produtos da indústria que contêm limoneno na sua constituição.

A figura 3 mostra a montagem de destilação por arrastamento de vapor para isolar o limoneno<sup>1</sup> do óleo de laranja.



Figura 3 - Destilação por arrastamento de vapor

O destilado (água e limoneno) é passado para uma ampola de decantação (Figura 4) onde se processa uma decantação em funil para separação dos dois líquidos imiscíveis e com diferentes densidades.

Figura 4 - Separação do limoneno (fase orgânica) da fase aquosa.

[Foto de Ana Knittel e Ana Rosa](#)



1 – D. Simão, “100 experiências de química orgânica”, 2011, ISTPress,1.

### Extração por “soxhlet” e destilação num rotavapor

A extração por soxhlet, é uma extração contínua com um solvente orgânico, onde se dá a evaporação parcial dum solvente que condensa no extrator sobre o sólido sendo depois reconduzido ao balão por um tubo lateral de sifão juntamente com o composto a extrair. Depois de vários ciclos, o solvente fica cada vez mais concentrado no composto que se pretende extrair (Figura 5). Nesta experiência vamos utilizar esta técnica para extrair a clorofila das folhas de espinafres<sup>2</sup>, composto foto receptor da luz visível, essencial para a realização da fotossíntese.



Figura 5 – Extração da clorofila em soxhlet

As folhas de espinafres depois de submetidas a esta extração ficam completamente descoloridas (Figura 6).



Figura 6 - Espinafres antes e depois da extração

Em seguida, separa-se o solvente por destilação recorrendo a um rotavapor ou evaporador rotativo (Figura 7).



Figura 7 – Destilação do etanol num rotavapor.

O solvente é evaporado e condensa no refrigerante, sendo recolhido num balão. Deste modo obtém-se o chamado extrato que contém os principais pigmentos existentes nas folhas de espinafres: clorofila a e b (Figura 8), além de outras substâncias em menor quantidade.

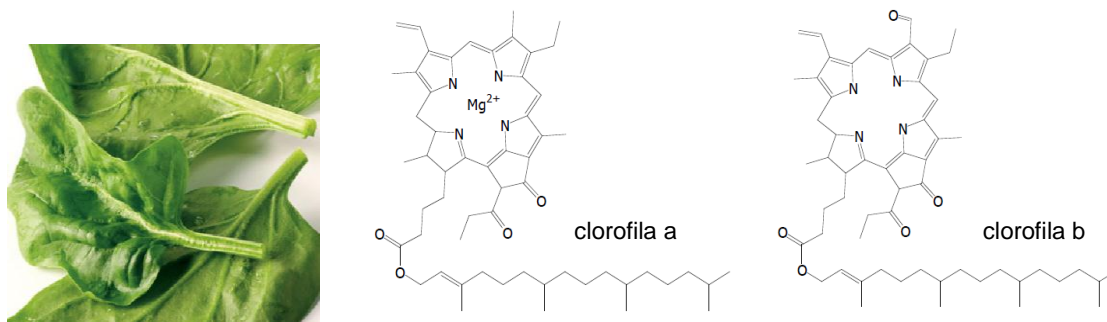


Figura 8 – Espinafres e estruturas químicas da clorofila a e b.

2 - D.J. Waddington; H. S. Finlay, *Organic Chemistry through Experiment*, Mills and Boon Ltd, London, 1977, 168.

### Preparação de um corante laranja (fenil-hidrazona)

Nesta experiência, exemplifica-se como se prepara um composto orgânico. Os aldeídos e cetonas reagem com a hidrazina e seus derivados originando as correspondentes hidrazonas com pontos de fusão muito bem definidos. Este é então um teste clássico para identificação de grupos carbonilo (C=O). Por exemplo é feita esta reacção para determinar aldeídos no fumo do tabaco. Serve também para caracterizar açúcares pois dão origem a sólidos cristalinos de pontos de fusão característicos. São igualmente conhecidas

hidrazonas com actividade antibacteriana e antibiótica e devido à sua forte coloração, (do amarelo ao vermelho) são também utilizadas como corantes.



Os reagentes desta reacção são a 2,4-dinitrofenil-hidrazina e o benzaldeído (Figura 9).

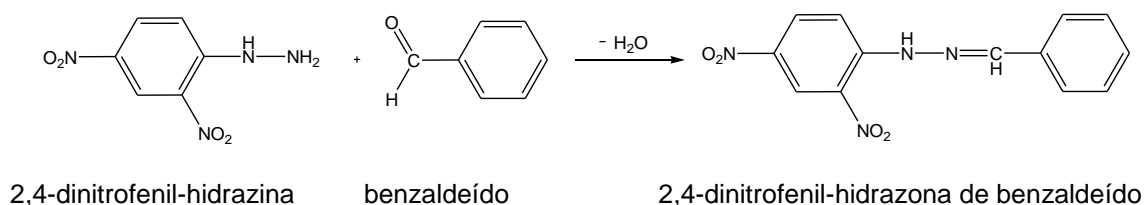


Figura 9 – Esquema reacional de formação do derivado de fenil-hidrazona.

Depois de se adicionarem os reagentes, passados alguns segundos, observa-se a precipitação da fenil-hidrazona<sup>3</sup>, cor de laranja, que é isolada por filtração em vácuo (Figura 10).



Figura 10 – Precipitação do produto e filtração em vácuo

[Fotos de Inês Pinto](#)

3 - A.I. Vogel, Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry, Longman Scientific and Technical, 5<sup>a</sup> Ed. 1989, 1257.

## Preparação de um polímero: Nylon

O nylon é uma fibra sintética com grande interesse industrial por ser muito resistente e flexível. Foi descoberto na tentativa de encontrar um material sintético com propriedades semelhantes às da seda. O nylon é um polímero, ou seja é constituído por grandes

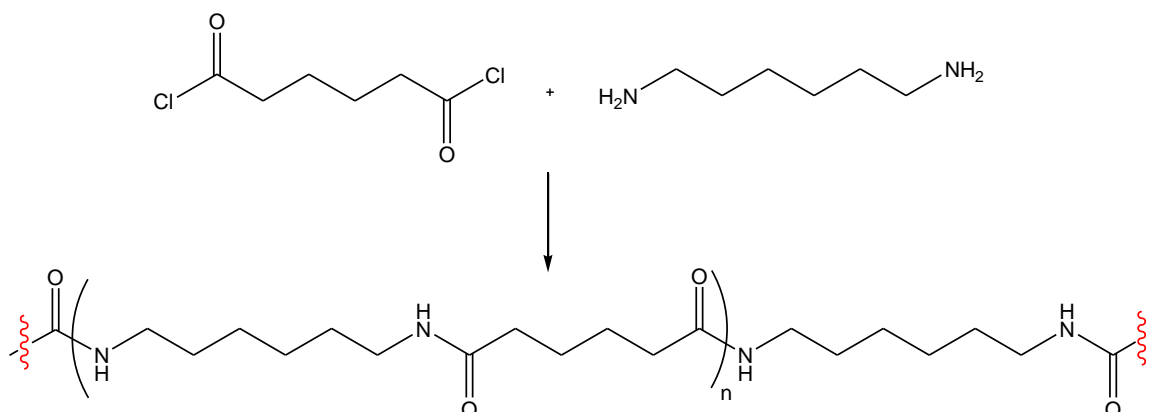


Figura 11 – Esquema reacional de formação do nylon.

moléculas (macromoléculas) formadas através de uma reacção denominada polimerização onde se dá a reacção entre moléculas menores (monómeros) para formar o polímero. Este polímero é uma poliamida, porque contém grupos  $\text{-CO-NH-}$  na sua cadeia principal de carbono. Nesta experiência este polímero vai ser sintetizado utilizando como reagentes o cloreto do ácido adípico e o 1,6 diamino-hexano. O fio de nylon é puxado com uma pinça à medida que se vai formando e pode ser enrolado numa proveta de plástico grande ou num sistema apropriado de roldana<sup>4</sup> (Figura 12).



Figura 12 – Formação do fio de nylon

4 - D. Simão, “100 experiências de química orgânica”, 2011, ISTPress, 291.



## Orgânica às escuras

### Reação de quimiluminescência

O seguinte composto orgânico é constituído por átomos de carbono e hidrogénio e chama-se trans-9-(2-feniletetil)antraceno (Figura 13). É um sólido amarelo cristalino<sup>5</sup>.

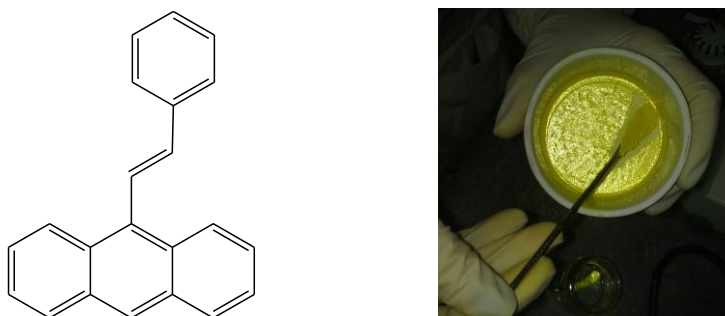


Figura 13 – Estrutura do trans-9-(2-feniletetil)antraceno e aspeto dos cristais amarelos.

[Foto de Ana Knittel e Ana Rosa](#)

Este composto vai ser usado como ativador (ACT) para demonstrar o fenómeno da quimiluminescência que consiste na emissão de luz quando uma molécula eletronicamente excitada devido a uma reação, regressa ao seu estado fundamental. Assim, a reação do cloreto de oxalilo com água oxigenada (peróxido de hidrogénio), forma um peróxido cíclico que interage com o ativador (ACT) originando o ACT no seu estado eletronicamente excitado, o qual emite luz fluorescente e volta ao estado fundamental (Figura 14).

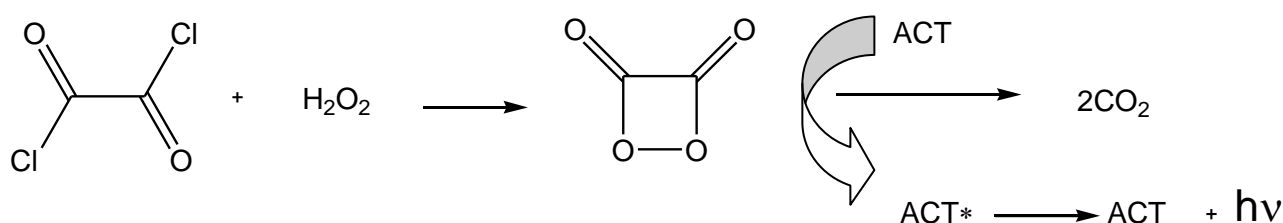


Figura 14 – Reação de quimiluminescência com o trans-9-(2-feniletetil)antraceno (ACT)

A adição das soluções, origina uma forte emissão de luz azul fluorescente durante 15 segundos, seguida de emissão de luz roxa durante mais 15 segundos (Figura 15). Verifica-se também a libertação de dióxido de carbono<sup>6</sup>.

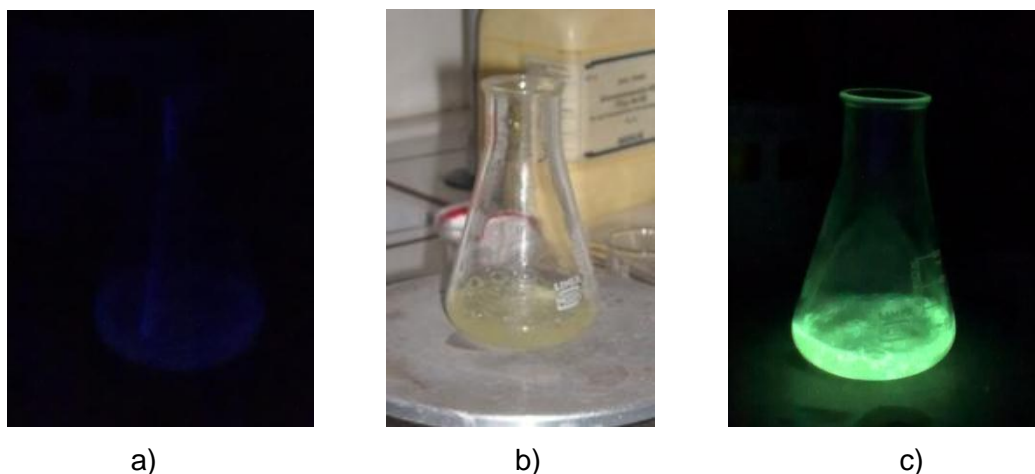


Figura 15 – Reação de quimiluminescência  
a) Antes da adição do ACT, antes da adição  
b) Emissão de luz azul fluorescente  
c) Emissão de luz roxa  
[Fotos de Joana Pereira, Bárbara Barata](#)

Quando este composto é dissolvido em etanol apresenta fluorescência e pode ser observado sob a lâmpada de ultra-violeta (Figura 16).



Figura 16 – Solução de trans-9-(2-feniletetil)antraceno em etanol sob a lâmpada de UV.

[Foto de Bárbara Barata](#)

Existem outros compostos orgânicos que são fluorescentes quando observados sob uma lâmpada de ultra violeta como por exemplo, o quinino existente na água tônica (Figura 17), a clorofila extraída anteriormente, a fluoresceína (Figura 18) muito utilizada para detecção de águas subterrâneas, exames oftalmológicos (angiogramas) e como marcador biológico, como por exemplo em química forense. Existem também compostos fluorescentes em notas, cartas de condução e outro tipo de documentos (Figura 19). Este tipo de análise é de igual modo usado em investigação criminal para verificação da validade de papel-moeda e de diversos documentos.



Figura 17 – Água tônica sob luz natural e sob luz ultra violeta



Figura 18 – Solução básica de fluoresceína sob luz natural e sob luz ultra violeta.

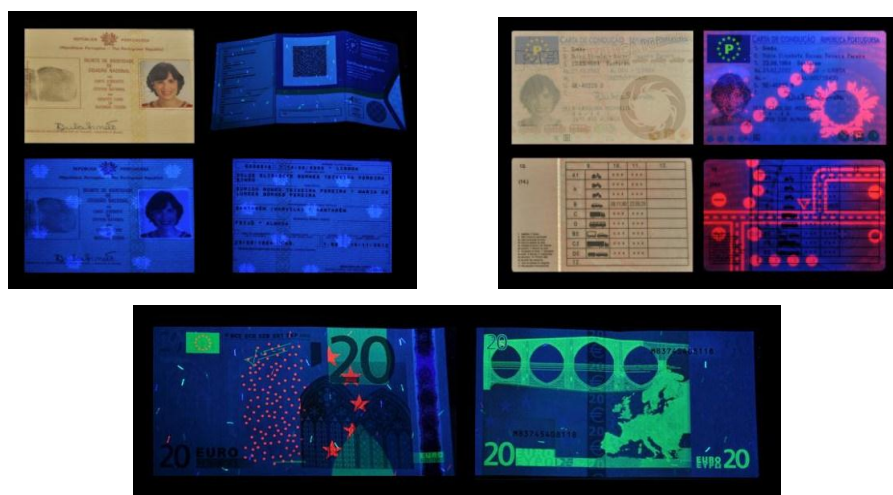


Figura 19 – Vários documentos e notas sob luz natural e sob luz ultra violeta.

5 - D. Simão, “100 experiências de química orgânica”, 2011, ISTPress, 199.

6 - R. Albertin et al, Química Nova, 21, 1998, 772.

# Equipa

## Coordenação

Maria Amélia Lemos  
Cristina Gomes de Azevedo

## Palestras

Alexandra M.M. Antunes  
A. M. Rego, A.M. Ferraria, M. Rei Vilar  
Ana Maria Almeida Mota  
João Moura Bordado  
José A. L. da Silva  
Laura Maria Ilharco  
Lubélia Penedo, Joaquim Gândara Marques  
Margarida Salema  
M. Matilde Marques  
Renato Carvalho

## Apoio na Realização

Isabel Leiria  
Jorge Teixeira  
Leonel Nogueira  
Lucinda Naia  
Lurdes Ribeiro

## Apoio Laboratorial

Ana Maria Carmo  
Ana Cartaxo  
Ana Rita  
Ana Rita Serra  
Ana Rita Vilas Boas  
Ana Sofia Borrego  
André Sancho  
Bárbara Sofia Durão Barata  
Beatriz Noriega Fernandes  
Eduardo Bras  
Estelle Garanhão  
Filipa Franco  
Filipa Ribeiro  
Francisco Patrocinio  
Frederico Montes  
Frederico Fonseca  
Gonçalo Fonte  
Gonçalo Santos  
Guilherme Carvalho  
Inês Lino  
Joana Figueiredo

## Logística

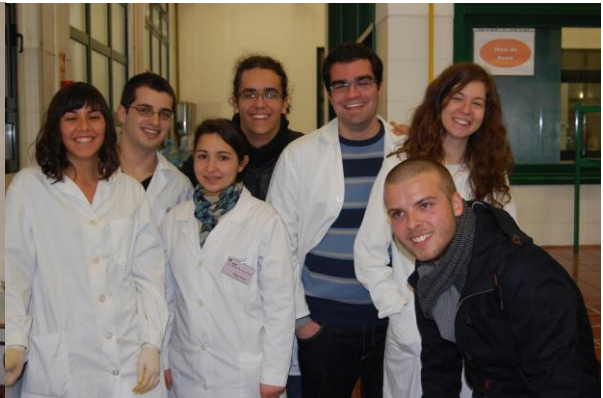
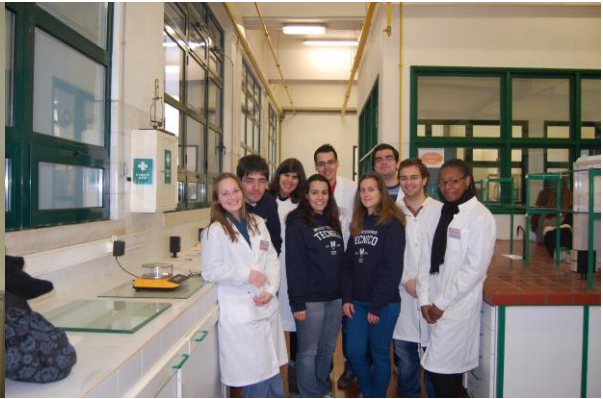
Susana Martins

## Módulos Experimentais

Anabela Coelho  
Dulce Simão  
Filipe Freire  
Fátima Coelho  
Francisco Lemos  
Francisco Patrocinio  
M. Amélia Lemos  
Sandra Silva  
Sara Pedro  
Sílvia Chaves  
Vasco Manaças

Marta Coelho  
Matilde Antunes  
Natividade Luís  
Nuno Simões  
Rosinda Leite

Joana Gonçalves Lourenço  
Joana Pereira  
João Bernardo  
João Moreira  
Maria de Fátima Calixto Carvalho  
Marina Padurean  
Marta Smith  
Raquel Afonso  
Ricardo Leandro  
Rui Almeida  
Rui Santos  
Sandra Silva  
Sara Pedro  
Tânia Santo  
Teresa Romano de Castro Torres  
Teresa Varandas Roque  
Thayná Camões  
Tiago Alexandre Dias  
Tiago Velez Ribeiro  
Vasco Manaças  
Vera da Silva



## Escolas Participantes

- Agrupamento de Escolas Alfredo da Silva
- Colégio S. João de Brito
- Colégio Sagrado Coração de Maria
- Escola Salesiana Oficinas de S. José
- Escola Secundária António Damásio
- Escola Secundária Anselmo Andrade
- Escola Secundária D. Filipa de Lencastre
- Escola Secundária D. Pedro V
- Escola Secundária da Sé
- Escola Secundária de Alcochete
- Escola Secundária de Camões
- Escola Secundária de Mem Martins
- Escola Secundária de Palmela
- Escola Secundária Emídio Navarro
- Escola Secundária Forte da Casa
- Escola Secundária Gil Vicente
- Escola Secundária José Gomes Ferreira
- Escola Secundária M<sup>a</sup> Amália Vaz de Carvalho
- Escola Secundária Pedro Santarém
- Externato Cooperativo da Benedita

**Patrocínio**



