

POTENCIAL DE PESQUISA QUÍMICA NAS UNIVERSIDADES BRASILEIRAS

PETER RUDOLF SEIDL



ASSOCIAÇÃO
BRASILEIRA DE QUÍMICA

PRESIDENTE DA REPÚBLICA
Fernando Collor de Melo

SECRETÁRIO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
José Goldemberg

PRESIDENTE DO CNPq
Gerhard Jacob

DIRETOR DE UNIDADES DE PESQUISA
José Duarte de Araújo

DIRETOR DE DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO E TECNOLÓGICO
Jorge Almeida Guimarães

DIRETOR DE PROGRAMAS
Darcy Closs

CETEM - Centro de Tecnologia Mineral

DIRETOR
Roberto C. Villas Bôas

VICE-DIRETOR
Peter Rudolf Seidl

CHEFE DO DEPARTAMENTO DE TRATAMENTO DE MINÉRIOS - DTM
Adão Benvindo da Luz

CHEFE DO DEPARTAMENTO DE METALURGIA EXTRATIVA - DME
Juliano Peres Barbosa

CHEFE DO DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INSTRUMENTAL - DQI
José Antonio Pires de Mello

CHEFE DO DEPARTAMENTO DE ESTUDOS E DESENVOLVIMENTO - DES
Ana Maria B. M. da Cunha

CHEFE DO DEPARTAMENTO DE ADMINISTRAÇÃO - DAD
Clarice Dora Gandelman



POTENCIAL DE PESQUISA QUÍMICA NAS UNIVERSIDADES BRASILEIRAS

Peter Rudolf Seidl*

CT-00005399-0

*Químico Industrial (UFRJ), MSc. e Ph.D. em Química (UCLA/EUA).

SED 17
CE

Tombo: 006209

ex: 1

POTENCIAL DE PESQUISA QUÍMICA
NAS UNIVERSIDADES BRASILEIRAS
SÉRIE ESTUDOS E DOCUMENTOS

FICHA TÉCNICA

COORDENAÇÃO EDITORIAL

Francisco R.C. Fernandes

REVISÃO

Milton Torres B. e Silva

EDITORAÇÃO ELETRÔNICA

Fátima da Silva C. Engel

Márcio Luís D. Lima

Ricardo Antonio N. Bezerra

ILUSTRAÇÃO

Jacinto Frangella

Pedidos ao:

CETEM/CNPq - Centro de Tecnologia Mineral
Departamento de Estudos e Desenvolvimento - DES
Rua 4 - Quadra D - Cidade Universitária - Ilha do Fundão
21949 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil
Fone: (021) 260-7222 - Ramal: 218 (BIBLIOTECA)

Solicita-se permuta.

We ask for change.

Seidl, Peter Rudolf

Potencial de pesquisa química nas universidades brasileiras/
Por Peter Rudolf Seidl.- Rio de Janeiro: CETEM/CNPq, 1991.

83p. - (Série Estudos e Documentos, 17)

1. Pesquisa química./Universidades e faculdades.

I. Centro de Tecnologia Mineral, Rio de Janeiro. II. Título. III. Série.

ISSN 0103-6319

ISBN 85-7227-015-9

CDD 540.72

estudos e

documentos

17

ISSN - O103 - 6319

POTENCIAL DE PESQUISA QUÍMICA NAS UNIVERSIDADES BRASILEIRAS

PETER RUDOLF SEIDL

 CETEM		
PATRIMÔNIO		
17-B - 3997		
COL. DE	VOL	VOL Nº
DATA	23/04/93	
REG. Nº		
BMB		



CETEM



ASSOCIAÇÃO
BRASILEIRA DE QUÍMICA

APRESENTAÇÃO

A pesquisa química resulta em benefícios para várias áreas diferentes. Entre essas estão as de Tecnologia Mineral e de Novos Materiais, de particular interesse para o CETEM.

Os esforços do Centro de Tecnologia Mineral - CETEM e da Associação Brasileira de Química - ABQ, somam-se assim para proporcionar um volume de referência sobre "A Pesquisa Química nas Universidades Brasileiras".

Objetiva-se divulgar o que está sendo realizado e promover o intercâmbio entre pesquisadores e potenciais usuárias de seus trabalhos.

ROBERTO C. VILLAS BÔAS
Diretor CETEM

PETER RUDOLF SEIDL
Presidente ABQ

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 1	
A QUÍMICA DE HOJE	3
Áreas da Química	5
- Química Orgânica	6
- Físico-Química	9
- Química Inorgânica	14
- Química Analítica	16
Instrumentação Científica	18
- Espectrometria de Massas	19
- Ressonância Magnética Nuclear	21
- Espectrometria Ótica	22
- Cristalografia de Raio X	25
- Cromatografia	26
- Instrumentos para Análise de Superfície	28
- Centros de Recursos Avançados	30
Informação em Química	33
CAPÍTULO 2	
A QUÍMICA NO BRASIL	37
Histórico	37
Estatísticas	40
Evolução Recente	50

CAPÍTULO 3	
QUÍMICA ORGÂNICA	55
Produtos Naturais	55
Físico-Química Orgânica	57
Síntese Orgânica	58
Análise Orgânica	59
Fotoquímica Orgânica	60
CAPÍTULO 4	
FÍSICO-QUÍMICA	63
Química Teórica	64
Espectroscopia	65
Eletroquímica	66
Outros Ramos	67
CAPÍTULO 5	
QUÍMICA INORGÂNICA	69
Principais Grupos	70
CAPÍTULO 6	
QUÍMICA ANALÍTICA	73
Principais Grupos	76
CAPÍTULO 7	
POLÍMEROS	79
Principais Grupos	79
CAPÍTULO 8	
CATÁLISE	81
Principais Grupos	82

INTRODUÇÃO

A Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP encomendou o presente trabalho com a finalidade de obter um diagnóstico e alternativas para a elaboração de um programa para a área. O documento visa mostrar os diferentes segmentos da pesquisa química a sua situação no País e apontar aspectos que mereçam a atenção da FINEP e outras agências.

Um levantamento preliminar de informações sobre área foi feito através da análise dos seguintes documentos:

PBDCT - Pesquisa Fundamental e Pós-Graduação (1974); Academia de Ciências do Estado de São Paulo (1978); CNPq - Avaliação e Perspectivas (1977, 1978 e 1982); textos de natureza semelhante, produzidos pelo PRONAQ, PADCT e FAPESP e anais e resumos de conferências, encontros e simpósios nas diferentes áreas da química. Essas informações foram completadas através da documentação existente na FINEP, CNPq e CAPES.

Consultas quanto ao documento e fontes adicionais de informação foram obtidos junto à FINEP, CAPES e CNPq. A metodologia constitui de uma abordagem por área, através da consulta a especialistas, realizada em janeiro de 1988.

Em abril foi realizado um levantamento de informações sobre aspectos da infra-estrutura de pesquisa. Para este fim foram feitos contatos como Plano Nacional de Bibliotecas Universitárias do SESU/MEC e Subprograma de Química e Engenharia Química do PADCT/Área de Informação do IBICT; com o Escritório de Projetos Especiais (responsável pelos Centros de Recursos Avançados) da National Science Foundation, nos EUA, e com fabricantes de equipamentos e insumos para a pesquisa.

Uma viagem aos EUA em maio/junho propiciou contatos na American Chemical Society e com participantes do 3º Congresso de

Química da América do Norte para uma apreciação da fronteira de pesquisa nos diferentes campos. Uma exposição industrial forneceu preços e modelos da mais recente geração de equipamentos para a pesquisa. Durante o ano de 1989 a minuta do documento e suas principais constatações foram alvo de críticas e sugestões por parte de membros da comunidade científica e funcionários de agências governamentais.

A realização deste trabalho foi possível graças ao apoio da Financiadora de Estudos e Projetos - FINEP, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, Centro de Tecnologia Mineral - CETEM e Associação Brasileira de Química - ABQ. Cabe um agradecimento a todos aqueles que contribuíram com informações, críticas e sugestões, especialmente: Fábio Celso M.S. Guimarães, Reinaldo Guimarães, Wilson Chagas de Araújo, José Jorge Campello R. Pereira, W.B. Kover, A.C. Massabni, M.A. Chaer do Nascimento, C.A.L. Filgueiras, D.W. Franco, E. Tfouni, O.A. Serra, F. Reis, A. Arnóbio S. Gama, L.A. Avaca, A. Curtius, C. Collins, Dorila P. Velloso, E.B. Mano, E. Ermel Monteiro, J. Comasetto, Jorge Guimarães, M. Auxiliadora Kaplan, M. Schmal, O. El-Seoud, Pérsio S. Santos, P. Bakusis, Roberto R. Coelho, Angelo C. Pinto, C. Kascheres, V.G. Toscano, Walter B. Mors, J.M. Riveiros, E.S. Vichi, G. Vicentini, E. A. Neves, Arthur F. Findeis, Eliane C. Louzão, Eloisa C. Marques, Edgard Rocca, Análio A. Rodrigues, Ivan Roberto Cerqueira, M. Aparecida H. Cagnin, Yone Chastinet, Tania M. Urbano da Silva, Ivan Rocha, Massaioshi Yoshida, B. Gilbert, F. Rader de Aquino Neto e Y.L. Lam.

O tratamento do material, interpretação de dados e conceitos emitidos são de responsabilidade exclusiva do autor.

CAPÍTULO 1

A QUÍMICA DE HOJE

A química é um campo da ciência e um setor da indústria. Conceitualmente, ela inclui a síntese, modificação ou degradação de moléculas com liberação ou armazenamento de energia nas ligações entre seus átomos. Além da importância da química como ciência em si, ela pode ser encarada como o elo entre estudos fundamentais sobre a estrutura e propriedades da matéria e seus desdobramentos, sejam eles em outros ramos de investigação (biologia, geologia, etc.) ou campos de aplicação (engenharia, agronomia, medicina, etc.). A química é uma ciência central, tanto para os processos vitais quanto para aqueles nos quais está baseada grande parte de nossa indústria de transformação. Além disso, reações químicas são utilizadas para preparar e analisar amostras em muitos dos demais campos da ciência e da tecnologia. Assim, o avanço das ciências experimentais, do desenvolvimento de novos processos e materiais, do monitoramento do meio ambiente em nosso planeta e da estratosfera, e da exploração de outros corpos celestes está estreitamente vinculada aos avanços da química.

Como um dos principais vetores do avanço tecnológico na indústria de transformação, a química foi, em grande parte, responsável pela "invasão" de setores tradicionais, como os de medicamentos, alimentos, roupas, móveis, etc. A substituição de materiais de origem extrativa por produtos sintéticos modificou profundamente a economia, os hábitos e os costumes de todas as regiões do mundo alcançadas pelo progresso.

A indústria química foi uma das principais beneficiadas com o deslumbramento que acompanhou o lançamento de novos medicamentos, pesticidas, plásticos e fibras, e centenas de outros produtos destinados a modernizar a indústria e a agricultura. Integrando

o trinômio pesquisa-engenharia-produção, a indústria química experimentou uma significativa lucratividade até o final dos anos 60. Dependendo da pesquisa para o desenvolvimento de novos produtos e processos, a indústria química propiciou um enorme avanço na química como ciência, desenvolvendo trabalhos de fronteira em seus próprios laboratórios, apoiando ou contratando trabalhos nas universidades e oferecendo carreiras estimulantes e bem remuneradas àqueles estudantes que optassem pela química.

É digno de nota que nos últimos vinte anos, enquanto a química passava por uma virtual evolução em termos de técnicas, instrumentação e habilidades, a indústria química passava por transformações de outra natureza. Elas resultaram de uma crescente preocupação com a ecologia, que parece acompanhar o desencanto com o próprio progresso, da ocorrência de seguidos acidentes com produtos químicos e dos dois “choques de petróleo” (que substituíram a tradicional crença de que investimento é um bom negócio pela conveniência de especular com estoques de matérias-primas da indústria química). “Reestruturação” passou a ser palavra de ordem. Certos tipos de unidade produtiva (de baixa rentabilidade ou poluentes, por exemplo) estão sendo desativados, e há uma nítida tendência de diversificação, tanto no sentido de produtos de maior valor agregado quanto de ingressar em outras áreas de produção. Sucedem-se as compras, vendas e fusões de divisões ou mesmo de empresas inteiras e suas relações com a pesquisa química que vêm sendo alteradas de maneira correspondente.

A química está vivendo um momento no qual a sociedade lhe impõe novos desafios em termos de elucidar (e até certo ponto, controlar) processos vitais e de elaborar novos materiais com propriedades cada vez mais específicas. Para trabalhos a nível molecular, a química lança mão, de forma crescente, de teorias e experimentos inicialmente desenvolvidos na física e apoiados na computação, enquanto suas descobertas contribuem principalmente para os avanços em outros campos. À medida que as interações entre

a química e outras disciplinas aumentam e suas fronteiras se tornam menos nítidas, a “indústria química” vai se transformando em “indústria de tecnologia”. Admite-se, inclusive, que a química esteja passando por uma metamorfose cujo desfecho ainda é objeto de muita reflexão e especulação.

Há uma certeza, entretanto: a química continuará a fornecer os conhecimentos fundamentais necessários para lidar com as demandas de nossa sociedade, inclusive aqueles que determinam a qualidade de vida e a estabilidade econômica.

ÁREAS DA QUÍMICA

A química é tradicionalmente dividida em química inorgânica, química analítica, química orgânica, físico-química e bioquímica. Os currículos dos cursos de química são organizados segundo essa divisão, e o ensino obedece à seqüência acima (as propriedades periódicas dos elementos e alguns conceitos relacionados ao comportamento quantitativo de moléculas podem ser englobados em “química geral”). A delimitação das áreas tem origens históricas e há uma crescente interpenetração entre as mesmas. Suas fronteiras se tornam menos nítidas à medida que fenômenos químicos são descritos a níveis cada vez mais fundamentais. Há também áreas claramente interdisciplinares como as de polímeros e de catálise que, exceto em seus aspectos muito particulares, não admitem classificação nas áreas tradicionais. Por outro lado, há certos tipos de fenômeno, os fotoquímicos ou eletroquímicos, por exemplo, que podem ser abordados segundo seus aspectos orgânicos, inorgânicos, físico-químicos, bioquímicos ou utilizados para fins analíticos. Também há áreas de investigações situadas nas fronteiras entre áreas como a química organometálica, ou o estudo de compostos onde metais tem como ligantes grupamentos orgânicos, ou a físico-química orgânica, onde técnicas físico-químicas são aplicadas ao estudo de reações orgânicas. Finalmente, há o caso particular da química analítica,

que utiliza fundamentos das outras áreas para um fim específico: a análise de substâncias.

Argumenta-se que uma classificação em “síntese”, “dinâmica” e “estrutura” refletiria melhor as divisões da química moderna. Entretanto, as áreas tradicionais continuam sendo largamente utilizadas para designar departamentos, cursos, livros, sessões de congressos, etc. Outras denominações como “química da...” ou “... química” são utilizadas ao lado destas para descrever um tipo específico de investigação ou aplicação.

A divisão entre a química orgânica e inorgânica é baseada nos elementos presentes nas substâncias que as constituem. A química orgânica é a química dos compostos do carbono combinado a outros elementos como hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, fósforo, enxofre, etc. A orgânica está intimamente vinculada ao tipo especial de estrutura dessas moléculas, e exclui normalmente óxidos e sulfetos simples de carbono, bem como compostos como ácido carbônico ou cianídrico e seus sais. Por exclusão, a química inorgânica compreende todos os compostos que não são orgânicos. Esta separação é baseada no grande número de compostos orgânicos que, sendo de interesse teórico ou prático, já foram ou poderão ser sintetizados. A físico-química é caracterizada pelo método de abordagem ao sistema químico, sem se importar com o fato de que seja orgânico ou inorgânico. A analítica está voltada para a identificação e determinação quantitativa de elementos e compostos em amostras de interesse, e a bioquímica compreende a química de sistemas biológicos.

Química Orgânica

A química orgânica era originalmente definida como “a química dos organismos vivos” – definição que serve hoje para a bioquímica – tendo evoluído para a química dos compostos de carbono. Ela

é tradicionalmente vinculada a aplicações tecnológicas, e inclui a química de produtos tão diversos quanto alimentos e combustíveis.

A química orgânica recebeu um extraordinário impulso na segunda metade do século passado, quando revelou o seu potencial para sintetizar moléculas de interesse econômico. A proliferação de novos compostos, a necessidade de determinar suas estruturas e o incentivo ao conhecimento e sistematização dos processos utilizados na sua produção deram origem ao relacionamento íntimo entre a pesquisa e suas aplicações industriais. Essa característica marcante do campo da química é ainda, em sua maior parte, devida à química orgânica. Para muitas pessoas a palavra “química” é imediatamente associada à química orgânica.

A pesquisa em química orgânica pode ser classificada segundo três grandes divisões: produtos naturais, físico-química orgânica e síntese orgânica. Estas são descritas em seguida.

.Produtos Naturais

Compreende o estudo de isolamento, caracterização e identificação estrutural das substâncias de origem vegetal ou animal na natureza. A identificação de novos produtos naturais – alcalóides e terpenos de plantas (inclusive as marinhas), antibióticos de fungos, e peptídeos de origem humana ou natural – está fortemente vinculada ao que é desenvolvido em outras disciplinas. A cromatografia permite a separação e isolamento de compostos presentes em pequenas quantidades de amostras complexas; a determinação da composição e estrutura (inclusive a estereoquímica) depende de métodos sofisticados de ressonância magnética nuclear (RMN), espectrometria de massas (EM) e cristalografia de raios X (CRX). Conhecimentos de botânica ou zoologia, farmacologia e medicina são necessários para uma completa investigação que cobre também a classificação das amostras (origem, ecologia) e os testes de sua atividade.

.Físico-Química Orgânica

Relaciona mudanças no comportamento físico, químico ou espectroscópico de compostos orgânicos às mudanças que ocorrem em sua estrutura molecular durante determinado processo. Procurando descrever, em detalhes, o caminho através do qual reagentes são transformados em produtos, a físico-química orgânica lança mão de métodos sintéticos (inclusive para fins de substituição isotópica) e técnicas cinéticas e/ou espectroscópicas para acompanhar a evolução de processos ou propriedades de interesse. A influência de fatores como solventes, temperatura, catalisadores, pH, etc. são analisadas em seus múltiplos aspectos com a finalidade de estabelecer uma base conceitual para prever o comportamento e possíveis rotas sintéticas para materiais ainda desconhecidos. A físico-química orgânica ganhou um impulso considerável no período entre 1940 e 1970, quando estudos fundamentais voltaram-se para esclarecer algumas das principais controvérsias em torno das teorias de estrutura e reatividade em química orgânica, acabando com o seu caráter essencialmente empírico-descritivo. Hoje suas abordagens e técnicas são largamente empregadas em outros campos, notadamente os de natureza biológica.

.Síntese Orgânica

É dedicada à construção de moléculas segundo objetivos bem definidos, procurando suplementar a disponibilidade de produtos naturais de interesse e preparar substâncias novas e úteis que não são encontradas na natureza. O desenvolvimento de rotas sintéticas (i.e. seqüências de reações químicas) que permitam o preparo de quantidades substanciais de produtos suficientemente puros para o consumo humano requer uma evolução criativa do processo e filosofia da síntese orgânica. Algumas décadas atrás, estratégias sintéticas eram baseadas em combinações inteligentes de reações já conhecidas (hoje elas podem ser simuladas por computador, possibilitando a comparação de rotas alternativas). Com o desenvolvimento do

raciocínio mecanístico, foi possível inventar novas reações que podem ser aplicadas a metas científicas específicas. O sucesso deste processo de raciocínio, que combina analogia, dedução e concepção, conferiu à síntese orgânica um alcance e potência sem precedentes.

A síntese recebeu também uma enorme contribuição em termos do desenvolvimento de novas técnicas preparativas. Entre estas, estão as condições nas quais as reações são conduzidas (ligadas a polímeros sólidos, em interfaces, sob condições extremas, induzidas por *lasers*, etc.), o uso de catalisadores para executar funções específicas, e o uso de reagentes capazes de controlar a estereoquímica de determinadas reações, conferindo aos produtos a desejada complexidade molecular tridimensional.

É fácil prever a continuidade dos avanços na química orgânica. Eles resultarão da interação entre as atividades de isolamento e determinação de estrutura (especialmente de produtos naturais), das investigações sobre estrutura e reatividade que caracterizam a físico-química orgânica e todo o processo criativo implícito em síntese orgânica. Suas interações com a físico-química, química inorgânica, química computacional, bioquímica e biologia tendem a aumentar rapidamente, dificultando a distinção entre essas áreas.

Físico-Química

A físico-química aborda, sob o ângulo físico, as outras áreas da química, da bioquímica, da biofísica, da engenharia química e da ciência dos materiais. Compreendendo os aspectos fundamentais dessas outras áreas, a físico-química serve de elo de ligação entre as mesmas. A físico-química inclui o estudo de todas as propriedades que podem ser medidas, o desenvolvimento de métodos experimentais e de instrumentais para fazer as medidas, a racionalização de medidas que já foram feitas, o desenvolvimento de teorias que podem ser expressas matematicamente e a previsão de valores de pro-

priedades que podem ser verificadas por medidas experimentais.

A evolução da físico-química a partir da segunda metade do século passado acompanhou a da cinética, da termodinâmica, de estudos eletroquímicos, de gases e de soluções. No início do século vinte, a química nuclear e a mecânica quântica proporcionaram à físico-química uma sólida base conceitual e abriram-lhe um novo e vasto ramo de investigação.

Os avanços na físico-química sempre têm sido impulsionados pelo aparecimento de novas técnicas de diagnóstico e medida, mas nada se compara ao papel crucial desempenhado pela instrumentação sofisticada e complexa, que vem abrindo novos ramos de investigação e ampliando as fronteiras da físico-química nas duas últimas décadas. Além dos instrumentos produzidos em série e utilizados principalmente para fins de análise e caracterização de substâncias, há alguns métodos instrumentais que estão ao alcance do pesquisador que disponha de recursos suficientes para adquiri-los. Além desses, temos:

.Lasers

Estão encontrando uma variedade crescente de aplicações, que dependem de uma ou mais das qualidades do *laser* de fornecer luz de intensidade extremamente alta, potência extremamente alta e pureza espectral extremamente alta, e/ou duração extremamente curta. Geralmente a configuração de um *laser* é ditada pela característica, entre outras, que seja mais importante para a experiência visada, mesmo às expensas das demais.

Houve três desenvolvimentos cruciais na tecnologia de *lasers* que tiveram um grande impacto sobre a química: uma grande variedade de *lasers* sintonizáveis passou a ser produzida comercialmente; a invenção de *lasers* de comprimentos de ondas curtas deu acesso a radiação ultravioleta à alta potência; e a capacitação para produzir pulsos de duração cada vez mais curtos, alcançando um

pico-segundo e além. Há muitos tipos diferentes de *lasers*, cobrindo certas faixas de comprimento de onda e de custos também variáveis. Os *lasers* mais potentes produzem apenas comprimentos de ondas discretos e são mais úteis no estudo de materiais sólidos (que geralmente possuem propriedades de absorção mais largas). Os *lasers* sintonizáveis são de maior importância para muitas aplicações químicas (inclusive aquelas que abriram todo um campo de espectroscopia não-linear) que incluem: espectroscopia Raman *antistokes* coerentes (CARS), espectroscopia de pico-segundos, espectroscopia de absorção saturada, espectroscopia de ionização multifoton, espectroscopia de ressonância magnética a *laser*, e muitas outras variações importantes de técnicas espectroscópicas conhecidas.

Computadores

O uso de computadores na química (em particular, na físico-química) acompanhou de perto o extraordinário desenvolvimento da computação nas últimas três décadas. O crescimento exponencial no número de computadores utilizados em laboratórios químicos encontra um paralelo no volume de recursos computacionais colocados ao alcance do químico. O uso sucessivo de computadores em experimentos pode ser classificado segundo três etapas distintas: a informatização da coleta de dados experimentais; a automação do processo de controle de experimentos através da monitoração, em tempo real, da evolução de parâmetros críticos daquele experimento; e de aplicações que se aproximam da inteligência artificial, onde o computador executa funções de alta complexidade no cálculo e/ou interpretação de dados. Microcomputadores são integrados em instrumentos específicos e podem monitorar dados de vários sensores simultaneamente. Técnicas de transformada de Fourier permitem a detecção de sinais fracos e são utilizadas de maneira rotineira em RMN e espectroscopia na região do infravermelho (IV). A realização de todo o potencial de aplicações da computação à química depende, entretanto, dos maiores computadores científicos, acopla-

dos a bibliotecas de *software* e recursos gráficos. A evolução da química teórica baseada em cálculos de estrutura eletrônica a partir de princípios básicos está intimamente relacionada ao desenvolvimento de *hardware* e *software* capaz do processamento de grandes quantidades de números precisos. A simulação da estrutura das supermoléculas de interesse biológico requer a minimização das energias correspondentes ao movimento simultâneo de centenas de átomos, tarefa que está ao alcance de apenas alguns tipos avançados de computador.

.Feixes Moleculares

Representam experimentos realizados em condições nas quais os reagentes se encontram a pressões tão baixas que cada molécula que reage possui, no máximo, uma oportunidade para colisão. O essencial da técnica é o fato de se ter um feixe definido, na direção que pode ser selecionada por velocidade. A colisão deve ocorrer em um volume pequeno, de maneira que a distribuição angular dos produtos ou das moléculas que colidem contenha muita informação. Nos últimos vinte anos o desenvolvimento de sistemas de feixes moleculares cruzados e fontes de feixes de alta intensidade transformaram esse método em uma poderosa ferramenta experimental para a investigação de reações químicas elementares, de processos de transferência de energia, e de potenciais intermoleculares. Nos últimos cinco anos, experimentos com feixes moleculares, especialmente aqueles acoplados a feixes supersônicos pulsados, tiveram um papel da maior importância na compreensão de aspectos fundamentais de reações químicas a nível microscópico.

De maneira geral, a pesquisa em físico-química é mais fragmentada e diversificada do que nas outras áreas da química. Ela é geralmente desenvolvida em grupos pequenos, ou mesmo por indivíduos, mas pode requerer equipamento cuja montagem custa bem acima de US\$ 100 mil. Suas principais divisões são descritas em seguida.

Termodinâmica – investigação de trocas e conteúdo energético.

Cinética química – estudo da velocidade e mecanismos de reação.

Dinâmica molecular – estudo dos fatores que controlam os aspectos temporais de mudanças químicas. Nada é mais fundamental à capacidade de controlar essas mudanças, e o aparecimento de um vasto arsenal de técnicas experimentais colocou a dinâmica molecular entre os ramos mais ativos da pesquisa química da fronteira.

Eletroquímica – investiga os eletrólitos e soluções eletrolíticas, inter-relacionando-se bastante com a química analítica, a química inorgânica e a química orgânica. Tem muitas aplicações práticas em processos eletrolíticos, conversão e armazenamento de energia, proteção de materiais, etc.

Espectroscopia – investiga espectros atômicos e moleculares e a sua relação com a constituição e estrutura de substâncias. Ela é normalmente dividida de acordo com a técnica empregada. A espectroscopia óptica é classificada também segundo o tipo de material utilizado.

Química-teórica – estuda fenômenos naturais a nível microscópico, promovendo a integração entre áreas através da simulação de propriedades fundamentais de átomos e moléculas e dos processos dos quais participam. A química teórica transcende a físico-química e está começando a receber um tratamento à parte.

Há ainda certos tipos de materiais ou técnicas cujo estudo poderia ser classificado segundo as divisões tradicionais, mas são freqüentemente destacados. Entre outros estão: química de interfaces, química ultra-rápida, soluções, fotoquímica, supercondutores, biofísica molecular, radioquímica, etc.

Química Inorgânica

A denominação "química mineral", utilizada em alguns países como sinônimo de química inorgânica, reflete bem suas origens. Seu desenvolvimento passa pelos compostos de enxofre e nitrogênio, carbonilas metálicas, catalisadores, química do boro e silício, hidretos metálicos e muitos outros tipos de substância. Após um período em que pouca coisa de interesse ocorreu na química inorgânica (entre os Prêmios Nobel de Química atribuídos em 1913 a A. Werner, que abriu um novo campo da pesquisa em química inorgânica, e aos de 1973 a E. O. Fischer e G. Wilkinson por seus trabalhos em organometálicos, tipo sanduíche, passaram-se 60 anos!) há um novo fermento na química inorgânica. Importantes descobertas em transferência de elétrons, catálise e reatividade, estado sólido e química inorgânica teórica voltaram a estimular a imaginação dos pesquisadores da área.

Grande parte dessa atividade ocorre na interface com outros ramos de investigação, como ocorre com a química bioinorgânica e a química do estado sólido, por exemplo. Amplia-se, assim, a interpenetração entre a química inorgânica e a química orgânica, a bioquímica, a biologia e a ciência dos materiais, enquanto suas aplicações industriais vão se multiplicando.

As fronteiras da pesquisa em química inorgânica se expandem ao longo dessas interfaces. Há um interesse incomum na química bioinorgânica, estimulado pela verificação de que processos vitais dependem de íons metálicos distribuídos pela Tabela Periódica. Espectroscopistas, químicos sintéticos e cristalógrafos procuram descobrir e simular a química inorgânica de processos biológicos. Estes pesquisadores colaboram no estudo da dinâmica de reações em sistemas proteicos, transferência e utilização de energia em células, transferência de sinais elétricos através do sistema nervoso, e o reconhecimento molecular em todos os níveis.

A interseção da química do estado sólido com a química inorgânica corresponde à outra dessas fronteiras. O progresso no estudo de reações químicas requer a aplicação de técnicas de ambas, e esses conhecimentos são vitais, não só para o preparo de novos catalisadores, mas também para a fabricação de semicondutores e *chips* eletrônicos. A síntese de novos materiais e o desenvolvimento de processos para controlar a sua microestrutura estão no cerne de uma parcela significativa do progresso científico e tecnológico dos últimos anos, e ainda há muito a conhecer ao nível dos átomos responsáveis por sua estrutura e propriedades.

A interface mais explorada é a da química organometálica. Essa é quase uma área em si, tendo gerado uma extensa literatura e importantes aplicações em processos catalíticos, sínteses utilizadas em química fina e a obtenção de novos tipos de polímeros. Seu progresso baseia-se na elucidação dos mecanismos de formação ou rompimento de ligações, transferência de íons ou elétrons, etc, e as abordagens da físico-química orgânica são utilizadas com sucesso para este fim.

A química inorgânica é mais difícil de subdividir, mas certos segmentos são claramente identificáveis. Assim como:

Química de Coordenação – preparação, caracterização e estudo de propriedades de complexos de metais e seus ligantes;

Termoquímica – estudo de trocas energéticas associadas às reações químicas, bem como a determinação de grandezas necessárias a esse estudo;

Reatividade – estudos sistemáticos de relações estrutura/propriedades. Inclui trabalhos preparativos, mecanísticos e técnicas de reações rápidas aplicadas a compostos inorgânicos ou organometálicos,

Materiais inorgânicos – preparação e estudo de propriedades de compostos no estado sólido.

Estudos espectroscópicos, fotoquímicos, eletroquímicos, ra-

dioquímicos ou teóricos também podem ser aplicados a compostos inorgânicos e organometálicos.

Química Analítica

A química analítica é voltada para a identificação de substâncias presentes em uma amostra e para a determinação da quantidade de uma ou mais das substâncias da amostra. Técnicas analíticas modernas tendem a basear-se no uso de instrumentos para medir uma propriedade física de um íon, átomo ou molécula, através da qual é realizada sua determinação.

Ao lado da química orgânica, foi na química analítica que desde cedo os resultados de pesquisa foram os mais marcantes. Os fundamentos da teoria química e a descoberta e caracterização de elementos químicos e os compostos que formavam foi o resultado da cuidadosa aplicação de técnicas quantitativas e qualitativas. O primeiro periódico de química analítica surgiu na segunda metade do século passado, e processos de análise volumétrica e gravimétrica, eletrólise quantitativa, medidas de gases e análise espectral, impulsionados por suas muitas diferentes aplicações, favoreceram o rápido desenvolvimento da química analítica. Neste século a radioquímica, a cromatografia e os avanços em instrumentação para espectrometria atômica e molecular proporcionados pela eletrônica e computação imprimiram um extraordinário progresso à química analítica.

O interesse recente em poluição proporcionou um desenvolvimento acentuado de métodos adequados à detecção e medida de traços de substâncias no ar, na água, em alimentos e em sistemas biológicos. Hoje existe um grande número de técnicas analíticas que são capazes de dosar quantidades mínimas de substâncias colhidas nas mais diversas condições e de quase qualquer tipo de amostra.

A caracterização e medida de espécies atômicas e moleculares – a química analítica quantitativa e qualitativa – contribuem, e,

por sua vez, são beneficiadas pelos avanços da ciência. As descobertas da física, química e biologia fornecem as bases para novos métodos analíticos e, reciprocamente, estas novas capacitações são centrais ao progresso da pesquisa em química, nas outras ciências, na medicina, bem como em suas aplicações ao monitoramento ambiental, controle industrial, saúde, geologia, agricultura e prevenção contra o crime. Os avanços nos diferentes ramos da química analítica podem ter as mais variadas origens, como por exemplo: técnicas, materiais ou instrumentos que possam ser utilizados em separações por cromatografia; eletrodos seletivos empregados em eletroanalítica; acoplamento de instrumentos, e, principalmente, as constantes modificações introduzidas nos equipamentos utilizados em análise química.

A mesma técnica pode ser aplicada em várias áreas diferentes, conferindo à química analítica uma característica absolutamente interdisciplinar. Seus objetivos são de desenvolver metodologias de análise e/ou separação e a instrumentação adequada a essas análises. Há uma diferença fundamental entre aplicações da química analítica, onde ela é empregada para resolver um problema específico, e seu estudo para fins acadêmicos, onde o método ou técnica é objeto do estudo em si.

A instrumentação analítica é uma área industrial de ponta e está experimentando uma rápida expansão. Uma crescente proporção da pesquisa em química analítica é desenvolvida nessas empresas e visa uma padronização e simplificação de métodos de análise. A tendência a longo prazo é a completa automatização dos laboratórios de analítica.

A química analítica admite as seguintes grandes divisões:

Eletroanalítica – é baseada em métodos eletroquímicos, incluindo a potenciometria, polarografia (eletrodos de mercúrio), voltametria, etc;

Espectroanalítica – utiliza métodos instrumentais como ultravio-

leta visível, absorção atômica, emissão, fluorescência, infravermelho, difração e fluorescência de raios X, etc;

Separações – inclui extração, co-precipitação, troca iônica e as diferentes cromatografias: planar, coluna (clássica e sofisticada – como a gasosa e a líquida de alta eficiência);

Termoanalítica – compreende a termogravimetria e outras medidas de mudança com temperatura;

Radioanalítica – é baseada nas aplicações radioquímicas, incluindo radioisótopos, ativação por nêutrons, fluorescência de raios X, etc;

Instrumentação – desenvolvimento de instrumentos para a química analítica;

Química Ambiental – compreende a aplicação de várias técnicas analíticas para a monitoração do meio ambiente. Embora exista uma tendência de classificá-la como área, a sua metodologia é essencialmente analítica;

Quimiometria – engloba as técnicas de tratamento de dados analíticos, aplicações de modelos matemáticos e o estudo de correlações de variáveis,

Métodos Clássicos – inclui os métodos qualitativos e de toque, bem como os quantitativos de gravimetria e volumetria.

INSTRUMENTAÇÃO CIENTÍFICA

Aumenta, em todo o mundo, a necessidade de acesso, por parte do cientista, à instrumentação avançada. A rápida obsolescência e os custos e sofisticação crescentes da instrumentação científica trazem grandes problemas para o pesquisador, que precisa trabalhar na fronteira do conhecimento e acompanhar a sua evolução a nível mundial.

A ciência atual não pode existir sem instrumentação moderna.

Pesquisa de ponta requer a melhor instrumentação ao nível do “estado-da-arte”. Entre os tipos mais importantes de instrumentos estão espectrômetros de massas, de ressonância magnética nuclear e de espectrometria ótica (absorção e emissão), difratômetros de raios X, *lasers*, cromatógrafos e instrumentação para estudos de superfícies. Estes instrumentos fornecem informações complementares sobre a estrutura de moléculas e, em alguns casos, interações entre moléculas, e são essenciais à pesquisa em química de hoje.

Espectrometria de Massas (EM)

A espectrometria de massas tornou-se, nos últimos vinte anos, um dos métodos mais sensíveis de análise química que se conhece. Nessa técnica, a molécula de interesse é transformada em um íon gasoso, que é acelerado a uma energia cinética conhecida, por um campo elétrico. A massa é determinada através de sua trajetória curvada em um campo magnético conhecido, ou seu tempo de percurso a uma distância fixa do detector. Padrões de fragmentação dos íons são obtidos e podem ser comparados aos de modelos ou moléculas conhecidas, por computador. Existem extensas bibliotecas de espectros que podem ser utilizadas para fins de comparação.

Uma das grandes vantagens desse tipo de espectrômetro é que pode ser acoplado a outras técnicas de separação. Esses sistemas de acoplamentos servem para separar componentes de misturas, e incluem uma variedade de métodos para vaporização e ionização da molécula e o uso com outras técnicas de separação ou análise. Onde for aplicável, o acoplamento de um sistema de fracionamento por cromatografia seguido de análise por espectrometria de massas constitui, provavelmente, o melhor instrumento analítico para trabalhos precisos, executados sobre amostras complexas das mais diversas origens e aplicações.

O desenvolvimento de instrumentação para EM tem sido im-

pressionante. O filtro de massas quadrupolar, que é geralmente simples e controlável por computador, revolucionou as "técnicas acopladas". Técnicas utilizadas para dessorver íons de amostras sólidas aumentaram dramaticamente a faixa de massas moleculares que podem ser analisadas (inclusive moléculas biológicas como peptídeos e proteínas). A aplicação de técnicas de Fourier e ímãs supercondutores permite chegar a resoluções muito altas e à medida simultânea e não-destrutiva de todos os íons.

Há um interesse crescente nas técnicas acopladas. Há benefícios sinérgicos na combinação de instrumentos computadorizados como cromatografia gasosa/espectrometria de massas (CG/EM), cromatografia líquida/espectrometria de massas, cromatografia gasosa/infravermelho com transformada de Fourier/espectrometria de massas (CG/IV/EM), espectrometria de massas/espectrometria de massas (EM/EM), e mesmo cromatografia gasosa/espectrometria de massas/espectrometria de massas (CG/EM/EM). Estas duas últimas técnicas, nas quais um espectrômetro de massas introduz íons de massas selecionadas na zona de ionização de um segundo espectrômetro, oferece perspectivas promissoras em termos de misturas de moléculas grandes. Ionização "branda", que evita uma fragmentação extensa, é utilizada para produzir uma mistura de íons moleculares, da qual se seleciona uma massa que é fragmentada mais vigorosamente para caracterizar a estrutura do componente correspondente. Esta técnica é especialmente indicada para amostras biológicas, onde grupos de compostos possuem propriedades estruturais comuns (ex: seqüências de aminoácidos de peptídeos), e as análises são realizadas em pequenas quantidades de amostra.

A espectrometria de massas admite muitas diferentes aplicações, e hoje existe uma extensa gama de instrumentos disponíveis comercialmente. Estes cobrem uma faixa de preços que vai de, aproximadamente, US\$ 50 mil para um "detetor de massas", até US\$ 700 mil para espectrômetros para massas altas. Equipamento auxiliar

e acessórios podem aumentar consideravelmente esses valores, e os custos de manutenção e operação crescem bastante com a complexidade do instrumento.

Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

A ressonância magnética nuclear é uma das mais poderosas técnicas de elucidação de estrutura e geometria a nível molecular. Apesar de não se aproximar da altíssima sensibilidade da EM, a RMN fornece informações detalhadas sobre a geometria molecular que não podem ser obtidas por outro método.

A RMN é baseada nas propriedades magnéticas de núcleos, e é extremamente sensível a fatores que afetam essas propriedades na vizinhança do núcleo que está sendo observado. Pouco tempo se passou entre a descoberta do fenômeno de RMN e sua utilização em espectrômetros produzidos comercialmente. O progresso tecnológico em termos de eletrônica e computação impulsionaram enormemente a RMN com a introdução de técnicas de Fourier. Ímãs supercondutores estenderam a técnica a campos e resoluções cada vez mais altas, e combinações de técnicas de computação ultrarápida com desenhos especiais e eletrônica avançada permitem a obtenção de espectros de alta resolução também para amostras no estado sólido. A diversidade de experimentos e o número de núcleos que podem ser investigados, apesar de sua baixa sensibilidade ou propriedades quadrupolares, vem crescendo continuamente.

Através de experimentos sofisticados é possível observar transições de múltiplos *quanta* e registrar espectros em "duas dimensões". Em ambos os tipos de experimento, informações que normalmente não são acessíveis são obtidas. Estas podem revelar interações entre átomos bastante afastados e proporcionar detalhes sobre a estrutura de moléculas complexas, mesmo quando não se consegue um monocristal (casos que excluiriam técnicas crista-

lográficas). Assim, informações cruciais sobre a conformação de moléculas de interesse biológico podem ser obtidas em condições próximas daquelas em que a molécula participa de processos vitais. Uma das novas aplicações da RMN extrapola a própria química: a obtenção de imagens para diagnóstico médico.

A RMN atingiu uma posição que a situa como um dos mais importantes meios para estudar a estrutura de uma molécula. Seu impacto sobre áreas tão diversas como química fina, polímeros, catálise, biologia, medicina, etc. tem sido enorme e suas aplicações em tecnologia industrial de ponta muito têm contribuído para impulsionar o crescimento impressionante no desempenho e volume de espectrômetros vendidos. Seus custos variam entre cerca de US\$ 50 mil para o instrumento mais simples, capaz de analisar apenas o núcleo de hidrogênio, até próximo de US\$ 1.200 mil para espectrômetros de mais alta resolução disponível comercialmente (600 MHz). Um aparelho para aplicações, que hoje seriam consideradas de rotina, fica na faixa US\$ 150-300 mil. Seus custos de operação e manutenção também são bastante altos.

Espectrometria Ótica

.Espectrometria de Absorção no Infravermelho, Ultravioleta e Visível

A medida da absorção da radiação nas regiões do infravermelho, ultravioleta e visível é a base de um método simples e adequado para a determinação de numerosas espécies inorgânicas e orgânicas. As mudanças de energia vibracional e às vezes também rotacional, e sua superposição com as transições eletrônicas, resulta, para íons e moléculas, em picos característicos ou bandas relativamente largas de absorção, que servem para caracterizar e quantificar as espécies envolvidas.

O instrumental básico para determinações quantitativas é muito barato (US\$ 10 mil) e, por isto mesmo, largamente difundido nos laboratórios analíticos, tanto industriais como de pesquisa. Micro-computadores, acessórios para aquecimento das amostras, possibilidades de obtenção rápida de espectros bem como a introdução da amostra e reagentes em fluxo (FIA) podem elevar substancialmente os custos desses instrumentos, tornando, por outro lado, as determinações mais rápidas, ou permitindo o estudo cinético de reações.

No caso de espectrometria no infravermelho, a introdução de técnicas de Fourier vem ampliando bastante o escopo da técnica. Pequenas quantidades de amostras podem ser rapidamente analisadas, permitindo o acoplamento à cromatografia gasosa, e a refletância difusa pode ser utilizada para amostras no estado sólido. O uso de técnicas de Fourier também contribuiu para uma redução no custo de instrumentos, pois não requer sistemas óticos muito sofisticados.

.Espectroscopia de Absorção Atômica

Nesta técnica a amostra é transformada em átomos gasosos que absorvem a radiação de uma fonte específica em um espectro constituído de linhas nítidas e bem definidas, correspondente ao número limitado de transições eletrônicas permitidas. A natureza discreta da absorção atômica leva a um alto grau de seletividade.

Inicialmente utilizada pelos astrônomos e astrofísicos para a determinação de elementos nas atmosferas dos corpos celestes, apenas a partir de 1955 se tornou um método utilizado em química analítica. Hoje, pelo custo relativamente baixo, alta sensibilidade e precisão, se tornou uma técnica largamente difundida, mesmo com o inconveniente de ser uma técnica unielementar, isto é, um elemento deve ser determinado após o outro, por causa da especificidade necessária para a fonte de radiação. Cerca de 70 elementos podem ser determinados diretamente e outros indiretamente.

Os atomizadores, isto é, os dispositivos que atomizam a amostra, mais comuns são a chama e o forno de grafite. De longe, a chama é o atomizador mais simples e mais utilizado, mas com sensibilidade, em geral, limitada em relação ao forno de grafite. Este, para a maioria dos elementos, tem limites de detecção em níveis de parte por bilhão e parte por trilhão.

Apenas na presente década, com o aquecimento rápido, conceito de isothermicidade, corretores adequados de fundo, eletrônica avançada, automatização, o forno conquistou o reconhecimento dos químicos analíticos, com uma utilização cada vez maior. Além da sensibilidade, apresenta como vantagens a pequena quantidade de amostra necessária (microlitros ou microgramas) e a análise direta de sólidos.

Ainda em desenvolvimento, protótipos já realizam a determinação multielementar por absorção atômica, utilizando fontes contínuas e monocromadores sofisticados.

Os preços dos modelos comerciais variam de US\$ 20 mil a US\$ 150 mil.

Um custo adicional a ser considerado, principalmente quando se usa o forno de grafite, dada a sua alta sensibilidade, são os reagentes e água ultra-puros que devem ser utilizados na manipulação das amostras, assim como atmosfera e vidrarias limpas no laboratório que não produzam a contaminação das mesmas. Estes custos são comuns a técnicas muito sensíveis.

.Espectrometria de Emissão Atômica

Esta técnica baseia-se no espectro de emissão de átomos e íons excitados na fase vapor. Por sua natureza, é uma técnica multielementar. Durante várias décadas a emissão radiante era estimulada pela energia térmica ou elétrica de uma chama, arco ou centelha. No caso da chama, a técnica é limitada a uns poucos elementos facil-

mente excitáveis (alcalinos e alcalino-terrosos), mas tem seu uso muito difundido pela simplicidade do espectrofotômetro utilizado, semelhante a um de absorção atômica com chama. Já o arco e a centelha requerem alta resolução do espectro, obtida através de uma parte ótica sofisticada. Por muito tempo, os espectros eram registrados em placas ou filmes fotográficos, e, em geral, se obtinham resultados apenas qualitativos ou semiquantitativos. Vários destes espectrógrafos ainda se encontram em operação no Brasil.

Mais recentemente, principalmente a partir da década passada, houve um ressurgimento da técnica de emissão, com a utilização de fontes de excitação mais eficientes, como o plasma induzidamente acoplado (ICP) e o plasma de corrente contínua (DCP). Nestes instrumentos as radiações dispersas são recebidas em fotomultiplicadores, e microcomputadores processam os sinais, permitindo uma análise multielementar muito rápida.

Enquanto o ICP requer uma amostra líquida ou solubilizada, outra fonte (a *Glow discharge lamp*) permite a determinação em amostras sólidas, sendo que ambas podem ser utilizadas em um mesmo espectrômetro.

Rapidez, precisão e baixos limites de detecção são as vantagens dessas novas fontes.

Os preços variam de US\$ 60 mil a US\$ 150 mil.

Nos últimos anos, foi comercializado o acoplamento ICP-Espectrometria de Massa, ainda inexistente no Brasil, mas conquistando laboratórios no exterior, permitindo sensibilidades extremamente altas. Os preços variam de US\$ 250 a US\$ 500 mil.

Cristalografia de Raios X (CRX)

A cristalografia de raios X é a técnica mais poderosa que existe para a determinação completa e precisa da estrutura tridimensional.

É vital para a elucidação das propriedades físicas e químicas de materiais e para a identificação de novas substâncias. Muitas vezes serve também para desvendar mecanismos de reação, especialmente dos processos que dependem da especificidade reagente/substrato que ocorrem na natureza.

A cristalografia tornou-se parte da caracterização de moléculas, sejam elas sintéticas ou naturais. Quando uma substância pode ser cristalizada, a determinação de sua estrutura por raios X provavelmente fornecerá as informações mais detalhadas que se pode obter sobre a sua identidade, estrutura molecular e conformação. Com a interpretação de dados por computador, complexidade molecular não é mais um problema (a principal limitação da técnica é a necessidade de obter um monocristal de boa quantidade).

Um aparelho típico custa entre US\$ 300 e 500 mil, dependendo de acessórios especializados, como dispositivos para alta ou baixa temperatura ou módulos para representação gráfica ou visual. A computação gráfica estendeu muito a possibilidade de representar moléculas complexas e hoje em dia é possível utilizar cores e outros recursos visuais capazes de revelar detalhes de relações espaciais. O custo de unidades para computação gráfica fica na faixa de US\$ 100 mil, mas estas requerem uma ligação com potentes computadores. Unidades para computação gráfica com computadores dedicados estão começando a aparecer e seu custo está na faixa de US\$ 150-200 mil.

Cromatografia

Os avanços em ciência e tecnologia vêm alcançando níveis cada vez maiores de complexidade. Diferentes amostras, das mais diversas origens, precisam ser analisadas, e matérias-primas de diferentes fontes são empregadas como insumos para a indústria. Os requisitos de pureza tornam-se progressivamente mais rígidos à medida

que o desempenho de um material depende de suas propriedades microscópicas. As técnicas de separação assumem, assim, um papel de crescente importância na química. Técnicas de separação aplicadas à química compreendem a aplicação de princípios, propriedades e técnicas à separação de elementos e compostos específicos das mais variadas procedências. Baseiam-se nas diferenças entre propriedades como: solubilidade, volatilidade, capacidade e propriedades iônicas ou biológicas de átomos e moléculas.

A análise de misturas complexas só é possível após o fracionamento em seus constituintes. O desenvolvimento de novos métodos de separação para fins analíticos é, portanto, um importante ramo de pesquisa. Neste contexto, não há nenhuma técnica mais eficiente e mais largamente aplicável do que a cromatografia. O método baseia-se no fato de que cada espécie molecular, tanto em estado gasoso quanto líquido, tem sua força de adesão ou facilidade de despreendimento específicas. As diferenças entre estas forças de adesão podem fornecer as bases para separação, dependendo de fatores como calor de absorção, volatilidade, solvatação, forma molecular, carga e distribuição de carga e funcionalidade. Uma vasta gama de propriedades moleculares pode ser utilizada para separações analíticas que requerem quantidades mínimas de amostra.

A cromatografia líquida vem experimentando um crescimento impressionante nos últimos anos. Isto se deu através de inovações como bombas especializadas capazes de produzir altas pressões e gradientes de fases móveis para dar velocidade e resolução, fases estacionárias imobilizadas quimicamente para dar seletividade e duração à coluna, e detectores eletroquímicos, fluorimétricos e por espectrometria de massas que são sensíveis a picogramas de amostra. Embora a cromatografia gasosa seja uma técnica mais madura, continuam a aparecer os avanços. Altas velocidades de separação, miniaturização, e colunas capilares de sílica fundida, capazes de separar milhares de componentes, são algumas das inovações recentemente introduzidas. Cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE)

e cromatografia gasosa de alta resolução (CGAR) são técnicas que vêm avançando rapidamente.

Cromatógrafos são equipamentos modulares que podem ser expandidos e/ou sofisticados de acordo com o emprego. Um modelo muito simples pode custar em torno de US\$ 25 mil. O preço aumenta à medida que é acoplado a outros módulos e comandado por microprocessadores, podendo chegar a US\$ 80-100 mil. Um laboratório de pesquisa normal geralmente conta com vários cromatógrafos, quer a gás, quer a líquido.

Instrumentos para Análise de Superfícies

A ciência das superfícies está em rápida expansão. Para vários fenômenos químicos, como adsorção ou catálise, por exemplo, a natureza e a composição da superfície é muito mais importante do que as propriedades no interior de um sólido. Isto ocorre por causa da capacidade incomum de formar ligações por parte dos átomos que estão na superfície de um material, e a reatividade de espécies líquidas ou gasosas pode ser substancialmente alterada em sua presença. Quando as estruturas moleculares de uma superfície são conhecidas, torna-se possível também traçar um paralelo com o que ocorre em condições convencionais e explorar melhor todo potencial representado por sua reatividade adicional.

Os extraordinários avanços no estudo de superfícies têm sido impulsionados pela vasta gama de importantes aplicações. As propriedades elétricas de superfícies e filmes finos têm importantes implicações para a miniaturização de semicondutores. O mesmo ocorre com a introdução de modificações em superfícies e o crescimento epitaxial de cristais, mas é na catálise que o estudo aprofundado de superfícies oferece a maior promessa de resultados.

Igualmente importante para avanço da ciência de superfícies foi o aparecimento de uma nova geração de instrumentos a partir de

1970. Técnicas diferentes, que empregam partículas como elétrons, íons, átomos nêutrons ou em seus estados excitados, ou fótons na faixa dos raios X até o infravermelho, fornecem informações sobre a estrutura e composição da superfície ou sobre a estrutura de espécies adsorvidas naquela superfície.

Há muitos tipos diferentes de instrumentos utilizados na análise de superfícies. Alguns exemplos, juntamente com suas abreviaturas mais comuns e preços aproximados são dados abaixo.

- Difração de elétrons de baixa energia (LEED) – revela a estrutura atômica de superfícies limpas e ordenadas. Tem, para a superfície, o mesmo papel que a cristalografia na determinação da estrutura de sólidos. Custa por volta de US\$ 150 mil.
- Espectroscopia Auger determina a composição de superfícies com uma sensibilidade de aproximadamente 1% para uma monocamada para a maioria dos elementos. Faixa de US\$ 150 mil a 200 mil.
- Espectroscopia fotoeletrônica de raios X (XPS ou ESCA) também determina a composição de superfícies e a região próxima das superfícies, bem como o estado de oxidação dos elementos da superfície. Cerca de US\$ 200 mil.
- Espectroscopia fotoeletrônica na região do ultravioleta (UPS e PES) remove elétrons da banda de valência dos átomos e moléculas da superfície, fornecendo informações sobre sua estrutura eletrônica. Cerca de US\$ 200 mil.

A superfície também pode ser investigada através dos padrões de espalhamento de fragmentos removidos através do bombardeamento por gases inertes ou feixes moleculares. Outras técnicas de análise como infravermelho, Raman, RMN, microscopia eletrônica de varredura e transmissão e até radiação sincrotrônica (através de dispositivo para a medida de estrutura fina da absorção de raios X estendida - EXAFS) podem ser empregadas na análise de superfícies.

Um problema envolvendo superfícies raramente é resolvido através de uma única dessas técnicas. Trabalhos de natureza avançada geralmente requerem acesso a três ou quatro dessas técnicas, e um laboratório bem equipado pode custar acima de US\$ 500 mil.

No caso específico da catálise, as técnicas de alto vácuo fornecem menos informações do que outros métodos que não requerem equipamento tão caro. Entre esses estão métodos que medem a textura e adsorção na superfície, como medidas de área, porosidade, termodessorção, termogravimetria, etc., e as adaptações de controle do ambiente em várias técnicas espectroscópicas utilizadas para outros fins, especialmente infravermelho, ressonância magnética nuclear e refletância de ultravioleta. Outras técnicas aproveitadas são espectroscopia Mössbauer, microscopia eletrônica (transmissão ou varredura) e EXAFS.

Centros de Recursos Avançados

À medida que a pesquisa química aumenta em complexidade, torna-se necessário o acesso a instalações, instrumentos ou grupos de instrumentos, e bases de dados cujos custos de aquisição, operação e manutenção os colocam fora do alcance da maioria dos pesquisadores individuais. Surgiu assim a concepção de "Centros" nos quais pesquisadores ou grupos com interesses comuns partilham determinados recursos. A criação de um centro implica na formalização de uma estrutura gerencial e organizacional, na alocação de recursos por prazos maiores e no desenvolvimento de atividades técnico-científicas de um porte considerável.

A instrumentação científica mais cara e sofisticada, por exemplo, seria bem mais acessível a um número maior de pesquisadores se fosse distribuída em Centros Regionais. Estes foram implantados nos EUA nos anos 1970, por agências como o National Institute

of Health (NIH) e National Science Foundation (NSF). Esta última estabeleceu um programa de centros regionais de espectrometria de massas, ressonância magnética nuclear, cristalografia de raios X, lasers, ciências da separação e ciência das superfícies.

O modelo utilizado foi o de aproveitar a capacitação existente, normalmente em universidades, elevando um laboratório local ao estado-da-arte de tal maneira que seus recursos ficariam disponíveis a outros usuários. O número e tipo de centro foram determinados a partir das propostas apresentadas, certos tipos de instrumentos de interesse mais geral (RNM, por exemplo) sendo mais difundidos. As propostas descrevem a natureza dos centros em termos gerais, incluindo as condições mínimas de gerência e garantias de acesso a todos os pesquisadores qualificados.

O orçamento de um centro prevê o financiamento por parte de várias fontes diferentes, inclusive a prestação de serviços. Inclui o custo inicial do equipamento novo, pessoal (gerente, pesquisador, operador, engenheiro eletrônico, secretárias), despesas com operação e manutenção, e a depreciação do equipamento. Este último item representa 15% do valor do instrumento por ano, já que em seis anos, em média, ele atinge a sua obsolescência técnica, i.e., a manutenção se torna um problema de maiores proporções. A uma média de cada seis anos, portanto, um centro deve estar em condições de repor seus instrumentos individuais.

O investimento inicial em equipamento depende de seu tipo, caindo em uma faixa de US\$ 500 mil a US\$ 1,2 milhão. Nos EUA, o funcionamento desses centros custa entre US\$ 200 e 450 mil anualmente.

O acesso por parte do usuário é a principal preocupação das agências que apóiam um centro. Fica claro que a continuidade do apoio depende diretamente da capacidade de atender a todos os usuários qualificados. Este ponto é cuidadosamente analisado a cada ano antes do processo de alocar recursos ao centro.

Os principais itens analisados na seleção do centro são:

- 1) planos de organização e administração, de divulgação do centro e suas atividades e de atendimento a outros grupos acadêmicos e indústrias daquela região;
- 2) experiência prévia em atividades semelhantes;
- 3) descrição e justificativa para o equipamento que está sendo comprado e do equipamento que já está disponível;
- 4) descrição da base científica da região a ser servida pelo centro;
- 5) previsão para a proporção entre a pesquisa própria e os serviços a serem prestados, mecanismos utilizados para assegurar acesso, critérios de prioridade e programação de uso (inclusive a formação de grupos de usuários, comitês assessores, etc.);
- 6) relação entre o centro e os programas da instituição na qual estará localizado, bem como extensão do apoio e comprometimento daquela instituição com o centro;
- 7) orçamento detalhado e sugestões quanto às tabelas de preços e contabilidade de custos, e
- 8) planos para o desenvolvimento de instrumentação, organização de *workshops* entre usuários e especialistas em instrumentação, oferta de cursos, etc.

Segundo técnicos da NSF, esse modelo funciona enquanto o pesquisador não vê outra alternativa para obter a instrumentação de que ele necessita. A instituição na qual o centro está localizado tem uma vantagem extraordinária sobre os demais usuários. Estes, por sua vez, quase sempre apresentam restrições quanto ao seu atendimento pelo centro, preferindo dispor de instrumento próprio.

Há mais de trinta centros desse tipo nos EUA, e a Europa e o Canadá também implantaram centros semelhantes. Os mais bem sucedidos são aqueles nos quais o gerente tem autoridade suficiente para lidar com todos os egos envolvidos. São dedicados à RMN ou à EM e funcionam em universidades com grande massa crítica de estudantes de pós-graduação. São supervisionados por comitês de aproximadamente vinte representantes do governo, universidades, indústria e pequenas e médias empresas. No início de suas atividades o acompanhamento é mínimo, mas após dois anos há inspeções no local e a avaliação é bastante severa, podendo levar a uma interrupção das atividades do centro.

INFORMAÇÃO EM QUÍMICA

A química é uma ciência que compreende quantidades imensas de informações. A cada ano, são publicados cerca de meio milhão de artigos, em mais de cento e quarenta países, e escritos em cinquenta línguas diferentes. Realizar um levantamento bibliográfico ou mesmo acompanhar a evolução da fronteira do conhecimento em um assunto de natureza química, em particular orgânica, é uma tarefa muito difícil.

Felizmente, a literatura da química é muito bem organizada. Semanalmente o Chemical Abstracts resume as principais informações contidas em livros, teses, relatórios, patentes bem como artigos de interesse para a química e engenharia química publicados em mais de doze mil revistas e outros periódicos. A sua cobertura é dividida em oitenta seções que, por sua vez, pertencem à bioquímica; química orgânica; química macromolecular; química aplicada e engenharia química; físico-química e química-analítica. As informações podem ser recuperadas através de índices por autor, assunto, fórmula, e no caso de patente ou substância, por número. São publicados também índices coletivos cobrindo períodos de cinco anos. O que cobre o período de 1977 a 1981, por exemplo, compreende 75 vo-

lumes, 131.445 páginas, e referências indexadas de 2,6 milhões de artigos, que ocupam mais de quatro metros de prateleira de uma biblioteca!

Existem outras obras de referência, como o Beilstein Handbuch der Organischen Chemie, que tem por meta registrar todos os compostos orgânicos conhecidos (cada ano aparece quase meio milhão de novos!), dando informações sobre a estrutura, suas propriedades físicas e químicas e métodos para prepará-los. O Science Citation Index, por outro lado, registra artigos que citam um dado trabalho, permitindo uma busca na literatura que cita aquele trabalho e, paralelamente, a evolução do assunto em questão na literatura.

Uma biblioteca de química deve conter essas obras de referência; as principais revistas que publicam artigos originais, como o Journal of the American Chemical Society, Journal of the Chemical Society, Chemische Berichte, Bulletin de la Société Chimique de France e suas congêneres; revistas de alerta como Chemical Titles ou Current Contents; os periódicos que publicam revisões por tópico ou por periódicos como o Chemical Reviews ou o Accounts of Chemical Research e os volumes sobre Annual Reviews..., Progress..., etc.; manuais e enciclopédias e textos e coleções especializadas.

Uma boa biblioteca requer coleções completas dos principais periódicos (algumas datam do início do século passado), condições adequadas para a conversa, consulta, leitura e reprografia, e bibliotecárias de nível adequado. O crescimento exponencial da literatura química levou à necessidade de ampliação de instalações, e, em alguns casos, à conveniência de microfilmar certos textos. Os preços das assinaturas aumentam rapidamente, especialmente nas áreas de ponta onde publicações especializadas são exploradas comercialmente (e não por sociedades científicas sem fins lucrativos) e os custos de completar coleções com número atrasados e, especialmente, edições antigas é bem mais alto ainda.

À medida que a literatura se expande, a dificuldade de recuperar

uma informação se multiplica, proporcionalmente. A partir de 1967 o Chemical Abstracts passou a ser armazenado em fita magnética. Este foi o começo da era dos bancos de dados em química. As informações podem ser acessadas em linha através de um computador pessoal ligado à rede adequada. As consultas são feitas utilizando os índices tradicionais ou através da representação da estrutura molecular desejada ou de outros membros daquela família de compostos, na tela do terminal. A rapidez e eficiência de levantamentos bibliográficos através de bases de dados contrabalançam seus custos relativamente altos (por volta de US\$ 130 por hora, pelo arquivo de substâncias, e de US\$ 60, pelos arquivos bibliográficos. A estes custos somam-se os de registro da informação e das telecomunicações utilizadas na consulta). Estima-se que, dentro de cinco anos, mais nenhuma das grandes empresas químicas nos EUA possuirá uma biblioteca.

CAPÍTULO 2

A QUÍMICA NO BRASIL

HISTÓRICO

Os primórdios do trabalho experimental em química no País podem ser traçados no início do século passado. O Laboratório Químico do Museu Nacional destinava-se à análise de produtos minerais e vegetais, mas seus trabalhos foram de pouca significação para a pesquisa química.

O ensino da química teve sua origem nas instituições fundadas no período em que o Brasil foi elevado a sede do império português. Neste particular, cabe destaque à Academia Real Militar e de Aplicação – antecessora do atual Instituto Militar de Engenharia – e da Escola Central – da qual derivou a Escola Politécnica do Rio de Janeiro, e ao Colégio Médico-Cirúrgico da Bahia. Assim, se a divulgação de conhecimentos químicos foi promovida por alguns professores da Academia Militar e diretores do Museu Nacional na primeira metade do século passado, coube aos vários professores das Faculdades de Medicina o principal incentivo à química até a fundação da citada Escola Politécnica, em 1874. Nessa época, apareceram os clássicos tratados de química, mas só muito isoladamente registraram-se tentativas de realizar trabalhos de pesquisa original (essas iniciativas, quase que limitadas ao Rio de Janeiro, podem ser atribuídas ao grande interesse do Imperador pelas ciências, procurando-as em todos os lugares e patrocinando seus trabalhos).

Cursos superiores regulares visando a formação de químicos surgiram por volta de 1920, subvencionados pelo Governo para formar profissionais aptos a suprir a indústria nascente do País. Este incentivo levou à criação tanto de escolas ou institutos de química isola-

dos, quanto a programas de química nas escolas de engenharia. A subvenção foi suspensa em 1930, levando algumas das instituições à acentuada fase de declínio. Formou-se, no entanto, a primeira geração de professores e profissionais da fase moderna da química brasileira. Já em 1926, a Escola Politécnica de São Paulo criou o curso de engenharia química pela fusão dos cursos de química e de engenharia industrial. No Rio, foi criada, em 1934, a Escola Nacional de Química, ligada inicialmente ao Departamento Nacional de Produção Mineral e incorporada à então Universidade do Brasil em 1967.

Trabalhos de investigação foram realizados em várias das instituições pioneiras, principalmente em função de iniciativas e esforços individuais. No entanto, a pesquisa fundamental, como atividade regular, foi iniciada na Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras da Universidade de São Paulo, cujo curso de Química começou em 1935. Os três primeiros doutores ali se formaram em 1942, sob a orientação dos professores alemães trazidos ao Brasil para implantar a nova escola. Os doutoramentos obedeceram, em linhas gerais, ao modelo alemão da época, em que a ênfase era colocada na pesquisa e os programas de estudo eram individuais. Apesar do número pequeno de estudantes, foi possível manter essa atividade ao longo dos anos, sem quebra de continuidade. A existência do regime de tempo integral, já razoavelmente instituído ao se fundar a Universidade, proporcionou condições mais favoráveis em São Paulo. Em outras universidades do País, as dificuldades de fixar o professor-pesquisador e proporcionar-lhe condições adequadas para o trabalho foram de muito maior monta.

Os primeiros cursos de pós-graduação no Brasil em Química e Engenharia Química nos moldes modernos foram implantados em 1962, junto ao recém-criado Instituto de Química da Universidade do Brasil (hoje Universidade Federal do Rio de Janeiro). Suas atividades foram iniciadas em março de 1963 e seu Programa de Engenharia Química foi um núcleo em torno do qual estabeleceu-se a

atual COPPE.

A reforma universitária, que em muitos casos veio favorecer o desenvolvimento da pós-graduação através do melhor aproveitamento dos recursos humanos e materiais, trouxe um sério problema para a química – a separação do ensino fundamental de sua componente aplicada. Por outro lado, a exemplo do que ocorreu nas demais áreas, a atuação de órgãos governamentais como o CNPq e CAPES, e mais tarde o BNDE (através da FUNTEC), e seu sucessor, a FINEP (através do FNDCT), tiveram um papel decisivo na implantação e consolidação das atividades de pesquisa e pós-graduação em química nas universidades. Cabe ainda mencionar o Plano Nacional de Pós-Graduação, no qual se insere o Plano Institucional de Capacitação Docente (PICD) e a atuação a nível estadual da FAPESP.

Mais recentemente o PRONAQ, implantado pelo CNPq e pela FINEP, introduziu novos mecanismos de articulação e programação na área de química. Entre estes, estão a cooperação entre universidades e empresas e a coordenação de esforços em torno de interesses comuns, sejam eles áreas de pesquisa (catálise ou química fina, por exemplo) ou aspectos relacionados à infra-estrutura técnico-científica (equipamentos, reagentes, informações, etc.). O PADCT, resultado da coordenação entre essas duas agências e a CAPES e a STI, aplicou recursos vultosos em diferentes subprogramas segundo regras bastante rígidas. Ainda é cedo, entretanto, para sentir seus efeitos.

A contribuição internacional à gênese ou revitalização de quase todas as linhas de pesquisa em química é facilmente identificável. As grandes fundações, como a FORD, Fulbright e Rockefeller, bem como agências governamentais (notadamente alemães), contribuíram com recursos substanciais para o estabelecimento ou consolidação de importantes programas que hoje estão na vanguarda da pesquisa universitária. O Programa CNPq/NAS constitui um marco em termos de cooperação internacional. Realizado no âmbito de um convênio com a National Academy of Sciences dos EUA, o pro-

grama tomou como base uma frutífera colaboração entre o Centro de Pesquisas de Produtos Naturais (antecessora do NPPN/UFRJ) e a Universidade de Stanford, e cobriu o período 1969-1976. Suas atribuições podem ser medidas segundo dois parâmetros: a implantação ou ampliação de trabalhos de pesquisa (especialmente em química inorgânica, fotoquímica e síntese orgânica) e a oportunidade para que pesquisadores mais jovens pudessem ultrapassar barreiras hierárquicas e administrativas para melhor realizar o seu potencial de liderança e criatividade. Nessa mesma linha, a colaboração entre o Instituto Militar de Engenharia e a Universidade de Paris serviu como base para um programa entre o CNPq e o CNRS da França, promovido pelo PRONAQ, e cujos efeitos já se fazem sentir nas áreas de catálise e materiais inorgânicos. A colaboração bilateral entre o CNPq e agências do governo alemão permitiu a implantação de programas de pós-graduação na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro e na Universidade Federal de Santa Maria.

ESTATÍSTICAS

A situação atual da química no Brasil e a sua evolução em anos recentes podem ser analisadas em termos numéricos. Dados obtidos dos documentos de "Avaliação e Perspectivas" do CNPq e mais recentemente, das estatísticas da CAPES proporcionaram o quadro descrito em seguida.

De acordo com a CAPES existiam, em 1987, 25 programas de pós-graduação em química em 17 universidades brasileiras. Estes "programas" não tem um significado homogêneo, pois a UFCE contribui com dois e a USP com quatro, enquanto a UNICAMP conta apenas com um. Há também omissões, como o caso da UNESP em Araraquara. Uma visão mais completa é dada pela Tabela 1, onde são relacionadas todas as universidades em que foi possível identificar atividade de pesquisa em química.

Analisando os dados fornecidos pela CAPES, pode-se verificar uma enorme concentração em termos de seus indicadores mais importantes (Tabela 2). Dos 554 docentes e 1.149 alunos em pós-graduação, 397 (i.e. 72%) dos docentes e 953 (ou 83%) dos alunos estão na região Sudeste. Todos os alunos de doutorado estudam nesta região em apenas quatro cidades: Rio de Janeiro, São Paulo, Campinas e São Carlos concentram 59% dos docentes, 73% dos doutores e 91% dos alunos de doutorado. São Carlos, uma cidade de pouco mais de 100 mil habitantes reúne quase o mesmo número de docentes que toda a região Nordeste com sua população de mais de 40 milhões. Pode-se argumentar que os números refletem padrões de desenvolvimento econômico e que a distribuição para a física não é muito diferente, mas não há dúvida que essa concentração é muito acentuada.

TABELA 1 - Universidades com Atividades de Pesquisa em Química*

<u>Região Norte</u>	
Universidade do Amazonas	(0)
Universidade Federal do Pará	(0)
TOTAL 2	(0)
<u>Região Nordeste</u>	
Universidade Federal do Ceará	(2)
Universidade Federal da Paraíba	(1)
Universidade Federal da Bahia	(1)
Universidade Federal do Piauí	(0)
Universidade Federal do Rio Grande do Norte	(0)
Universidade Federal de Alagoas	(0)
Universidade Federal de Sergipe	(0)
TOTAL 7	(4)
<u>Região Centro-Oeste</u>	
Universidade de Brasília	(1)
TOTAL 1	(1)
<u>Região Sudeste</u>	
Universidade Federal de Minas Gerais	(1)
Universidade Federal do Rio de Janeiro	(4)
Instituto Militar de Engenharia	(1)
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro	(1)
Universidade Federal Fluminense	(0)
Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro	(1)
Instituto Tecnológico de Aeronáutica	(0)
Universidade de São Paulo/São Paulo	(4)
Universidade Estadual de Campinas	(1)
Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz	(0)
Universidade de São Paulo/São Carlos	(2)
Universidade Federal de São Carlos	(1)
Universidade Estadual Paulista	(0)
Universidade de São Paulo/Ribeirão Preto	(1)
TOTAL 14	(17)
<u>Região Sul</u>	
Universidade Federal do Paraná	(0)
Universidade Estadual de Maringá	(0)
Universidade Federal de Santa Catarina	(1)
Universidade Federal do Rio Grande do Sul	(1)
Universidade Federal de Santa Maria	(1)
TOTAL 5	(3)
TOTAL GERAL: 29	(25)

TABELA 2 - Distribuição Geográfica da Pós-Graduação em Química - CAPES-1987

REGIÃO	DOCENTES		ALUNOS	
	TOTAL	DOCTORES	TOTAL	DOCTORANDOS
Norte	0	0	0	0
Nordeste	74	41	68	0
UFCe	42	22	39	0
UFPb	14	11	03	0
UFBa	18	8	26	0
Centro-Oeste	17	17	8	0
UnB	17	17	8	0
Sudeste	397	287	953	336
UFMG	47	36	95	31
UFRJ	73	43	143	36
IME	14	8	16	4
PUC/RJ	20	17	53	13
UFRRJ	21	8	19	0
USP/SP	75	50	218	118
UNICAMP	57	57	236	93
USP/SC	45	33	114	41
UFSCar	24	20	43	0
USP/RP	21	15	16	0
Sul	76	50	120	0
UFSC	34	34	102	0
UFRGS	23	8	9	0
UFSM	19	8	9	0
TOTAL	564	395	1.149	336
Rio	128	76	231	53
São Paulo	75	50	218	118
Campinas	57	57	236	93
São Carlos	69	53	157	41
Subtotal	329	236	842	305
% TOTAL	58,3	65,8	73,3	90,8

* Número em parênteses indica a quantidade de programas identificados pela CAPES em 1987.

Em termos de números globais, duas comparações são ilustrativas. Nos EUA cerca de 200 universidades oferecem o doutoramento em química, contando com aproximadamente 4.000 doutores como professores, uma média de 20 por programa e muito bem distribuídos. Mesmo nas universidades maiores, onde as turmas de graduação são numerosas, raramente o número de docentes ultrapassa 40. Para fins de comparação no País, pode-se verificar que os números para a física representam por volta do dobro dos correspondentes para a química (nos EUA as proporções são aproximadamente as mesmas).

A consulta a especialistas forneceu as informações que constam do Quadro 1. Foi possível distribuir a atividade de pesquisa por cinco ramos distintos da química orgânica, treze da físico-química, dez da química inorgânica, nove da química analítica, além das áreas interdisciplinares de polímeros e catálise. Há também uma enorme desigualdade, de universidade para universidade, ou de região para região. Os pesquisadores em condições de orientar uma tese ou liderar uma equipe de pesquisas também foram apontados pelos especialistas. Sua distribuição por área está na Tabela 3.

Os ramos de pesquisa nos quais esses orientadores atuam é dado na Tabela 4. Vários orientadores atuam em mais de um tipo de pesquisa, logo esta Tabela reflete valores relativos e não absolutos. Aqui também é possível verificar um certo grau de concentração, já que mais da metade dos pesquisadores de todas as áreas estão concentrados em dois ou, no máximo, três tipos de trabalhos.

QUADRO 1 - Áreas de Pesquisa por Instituição

REGIÃO/ INSTITUIÇÃO	ÁREAS DE PESQUISA
<u>Região Norte</u> UAm UFPa	Química Orgânica: Produtos Naturais Química Orgânica: Produtos Naturais Físico-Química: Combustão e Termoquímica
<u>Região Nordeste</u> UFCE	Química Orgânica: Síntese Orgânica, Produtos Naturais Química Inorgânica: Química de Coordenação, Aplicações Tecnológicas
UFPi	Química Inorgânica: Aplicações Tecnológicas
UFPe	Química Inorgânica: Termoquímica, Materiais Inorgânicos, Organometálicos e Catálise Homogênea Química Orgânica: Síntese Orgânica
UFRN	Físico-Química: Espectroscopia, Química Teórica, Biofísica Molecular Química Inorgânica: Materiais Inorgânicos
UFAL UFSe UFBa	Físico-Química: Combustão e Termoquímica Química Inorgânica: Compostos de Coordenação, Termoquímica, Catálise Química Inorgânica: Materiais Inorgânicos Química Inorgânica: Aplicações Tecnológicas Química Inorgânica: Química de Coordenação Química Analítica: Espectroanalítica, Separações, Química Ambiental
<u>Região Centro-Oeste</u> UnB	Química Orgânica: Síntese Orgânica Físico-Química: Química Teórica Química Inorgânica: Química de Coordenação, Fotoquímica Inorgânica Química Analítica: Eletroanalítica, Espectroanalítica
<u>Região Sudeste</u> UMF	Química Orgânica: Síntese Orgânica, Físico-Química Orgânica, Produtos Naturais Físico-Química: Cinética, Espectroscopia, Química Teórica, Difração de Raios X Química Inorgânica: Química de Coordenação, Reatividade, Química do Positrônio
UFRJ	Química Analítica: Separações Química Orgânica: Síntese Orgânica, Físico-Química Orgânica, Análise Orgânica, Produtos Naturais, Fotoquímica Orgânica Físico-Química: Espectroscopia, Química Teórica, Dinâmica de Colisões, Ligações Hidrogênio Química Inorgânica: Espectroscopia e Inorgânica Teórica, Aplicações Tecnológicas Polímeros Catálise

QUADRO 1 - Áreas de Pesquisa por Instituição.(Cont.)

REGIÃO/ INSTITUIÇÃO	ÁREAS DE PESQUISA
<u>Região Sudeste</u> IME	Química Orgânica: Síntese Orgânica, Físico-Química Orgânica Físico-Química: Espectroscopia Catálise
PUC	Físico-Química: Química Teórica Química Inorgânica: Reatividade, Materiais Inorgânicos, Espectroscopia e Inorgânica Teórica, Aplicações Tecnológicas Química Analítica: Eletroanalítica, Espectroanalítica, Separações, Radioanalítica, Química Ambiental
UFF UFRRJ USP/SP	Físico-Química: Química Teórica Química Orgânica: Produtos Naturais Química Orgânica: Síntese Orgânica, Físico-Química Orgânica, Produtos Naturais, Fotoquímica Orgânica Físico-Química: Eletroquímica, Espectroscopia, Sistemas Miscelares e Coloidais, Fotoquímica, Dinâmica de Colisões, Cristais Líquidos Química Inorgânica: Química de Coordenação, Reatividade, Aplicações Tecnológicas Química Analítica: Eletroanalítica, Espectroanalítica, Separação, Termoanalítica, Instrumentação, Química Ambiental Catálise
UNICAMP	Química Orgânica: Síntese Orgânica, Físico-Química Orgânica, Produtos Naturais Físico-Química: Termodinâmica, Espectroscopia, Química Teórica, Sistemas Miscelares e Coloidais, Fotoquímica, Cristais Líquidos Química Inorgânica: Química de Coordenação, Termoquímica, Reatividade, Materiais Inorgânicos, Espectroscopia e Inorgânica Teórica, Organometálicos e Catálise Homogênea, Fotoquímica Inorgânica, Aplicações Tecnológicas Química Analítica: Eletroanalítica, Espectroanalítica, Separações, Termoanalítica, Radioanalítica, Instrumentação, Química Ambiental Polímeros Catálise

QUADRO 1 - Áreas de Pesquisa por Instituição.(Cont.)

REGIÃO/ INSTITUIÇÃO	ÁREAS DE PESQUISA
<u>Região Sudeste</u> ESALQ/CENA USP/SC	Química Analítica: Instrumentação Química Orgânica: Físico-Química Orgânica, Análise Orgânica, Fotoquímica Orgânica Físico-Química: Cinética, Eletroquímica, Química Teórica, Fotoquímica Química Inorgânica: Química de Coordenação, Espectroscopia e Inorgânica Teórica, Cristalografia Química Analítica: Eletroanalítica, Separações, Radioanalítica Catálise
UFSCar	Química Orgânica: Síntese Orgânica Físico-Química: Eletroquímica, Química Teórica, Dinâmica de Colisões Química Inorgânica: Reatividade, Fotoquímica Inorgânica Química Analítica: Radioanalítica Polímeros Catálise
UNESP	Química Inorgânica: Química de Coordenação, Reatividade, Materiais Inorgânicos, Espectroscopia e Inorgânica Teórica, Organometálicos e Catálise Homogênea Química Analítica: Separações, Química Ambiental
USP/RP	Química Orgânica: Síntese Orgânica, Físico-Química Orgânica, Fotoquímica Orgânica Físico-Química: Eletroquímica, Espectroscopia, Química Teórica, Ligação Hidrogênio, Simulação Química Inorgânica: Química de Coordenação, Reatividade, Eletroquímica, Organometálicos e Catálise Homogênea, Fotoquímica Inorgânica
<u>Região Sul</u> UFRP	Química Orgânica: Análise Orgânica Química Analítica: Separações
UEM UFSC	Química Inorgânica: Materiais Inorgânicos Química Orgânica: Físico-Química Orgânica Físico-Química: Termodinâmica, Cinética, Eletroquímica, Cristais Líquidos, Simulação Química Inorgânica: Eletroquímica
UFRGS	Química Orgânica: Físico-Química Orgânica Físico-Química: Sistemas Miscelares e Coloidais Química Inorgânica: Química de Coordenação, Materiais Inorgânicos, Organometálicos e Catálise Homogênea Polímeros
UFMS	Química Inorgânica: Química de Coordenação Química Analítica: Química Ambiental

TABELA 3 - Distribuição de Orientadores por Área

ÁREA	ORIENTADORES	%
Química Orgânica	80	27,6
Físico-Química	67	23,0
Química Inorgânica	70	24,0
Química Analítica	51	17,5
Polímeros	13	4,5
Catálise	10	3,4
TOTAL	291	100

TABELA 4 - Ramos de Atividades dos Orientadores

	ORIENTADORES QUE ATUAM	PROPORÇÃO(%)
<u>Química Orgânica</u>		
Síntese Orgânica	39	35,8
Produtos Naturais	34	31,2
Físico-Química Orgânica	21	19,3
Análise Orgânica	9	8,2
Fotoquímica Orgânica	6	5,5
<u>Físico-Química</u>		
Química Teórica	27	31,8
Espectroscopia	14	16,5
Eletroquímica	9	10,6
Cinética	6	7,1
Sistemas Miscelares	6	7,1
Fotoquímica	5	5,9
Dinâmica de Colisões	5	5,9
Cristais Líquidos	4	4,7
Termodinâmica	2	2,3
Biofísica Molecular	2	2,3
Ligação Hidrogênio	2	2,3
Simulação	2	2,3
Difração de Raios X	1	1,2
<u>Química Inorgânica</u>		
Química de Coordenação	30	31,6
Organometálicos e Catálise Homogênea	13	13,7
Materiais Inorgânicos	13	13,7
Reatividade	10	10,5
Espectroscopia e Inorgânica Teórica	10	10,5
Termoquímica	10	10,5
Eletroquímica	5	5,3
Fotoquímica Inorgânica	4	4,2
Cristalografia	3	3,2
Química do Positrônio	1	1,0
<u>Química Analítica</u>		
Eletroquímica	16	22,3
Química Ambiental	13	18,0
Separações	13	18,0
Instrumentação	10	13,9
Espectroanalítica	9	12,5
Radioanalítica	7	9,7
Termoanalítica	2	2,8
Métodos Clássicos	1	1,4
Quimiometria	1	1,4
<u>Polímeros</u>		
Polímeros	15	100
<u>Catálise</u>		
Heterogênea Ácido-Base	7	36,8
Heterogênea por Metais	7	36,8
Homogênea	5	26,4

EVOLUÇÃO RECENTE

É interessante comparar a situação atual com a de alguns anos atrás. A Tabela 5 mostra que o número de doutores em tempo integral nas universidades vem crescendo, tendo mais do que triplicado nos últimos 13 anos. O número aumenta, tanto com a abertura de novos programas quanto à expansão de alguns dos existentes. A taxa incremental diminuiu consideravelmente, entretanto, do período 1973-1977 para os períodos de 1977-1981 e 1981-1986. As maiores taxas de crescimento ocorreram fora das principais instituições (com exceção da UFRJ) e nas regiões Nordeste e Sul, indicando que a concentração tende a diminuir.

A posição relativa das áreas da química também está passando por alterações. Comparando os dados da Tabela 3 com os de anos atrás (Tabela 6), verifica-se que há também uma tendência de desconcentração. A posição relativa da química inorgânica vem melhorando rapidamente, em particular, às expensas da química orgânica e química analítica. A distribuição dentro das áreas também vem sendo alterada. Uma comparação da Tabela 4 com a Tabela 7 proporciona uma indicação dessas mudanças. Na química orgânica, síntese e produtos naturais trocaram de posição relativa, enquanto a físico-química orgânica substituiu a análise orgânica em terceiro lugar. Na físico-química, houve um grande crescimento em química teórica e um decréscimo significativo em cinética. Em química inorgânica, o aparecimento de várias novas linhas de pesquisa levou a uma diminuição da ênfase em química de coordenação. Em química analítica verificou-se um rápido crescimento da eletroanalítica e química ambiental, um crescimento menor em cromatografia e uma relativa estabilidade em espectroanalítica. Deve ser ressaltado ainda o crescimento das áreas interdisciplinares, indicando que os esforços dispendidos por pesquisadores e órgãos de governo vêm frutificando.

TABELA 5 - Doutores em Tempo Integral: 1973-1986

	1973*		1976**		1977**		1981**		1986***	
	Nº	%	Nº	%	Nº	%	Nº	%	Nº	%
UFCE	2	1,6	—	—	15	6,6	12	4,8	22	5,6
UFPb	—	—	—	—	—	—	—	—	11	2,8
UFBa	3	2,5	1	0,6	2	0,9	4	1,6	8	2,0
UnB	8	6,6	11	6,2	11	4,8	16	6,4	17	4,3
UFMG	16	13,1	17	9,6	18	7,9	22	8,8	36	9,1
UFRJ	13	10,7	22	12,4	20	8,8	22	8,8	43	10,9
IME	8	6,5	8	4,5	9	4,0	5	2,0	8	2,0
PUC/RJ	6	4,9	11	6,2	10	4,4	10	4,0	17	4,3
UFRRJ	1	0,8	3	1,7	5	2,2	—	—	8	2,0
USP	46	37,7	61	34,5	68	29,9	41	16,3	50	12,7
UNICAMP	15	12,3	28	15,8	27	11,9	43	17,1	57	14,4
USP/SC	4	3,3	12	6,8	10	4,4	18	7,2	33	8,3
UFSCar	—	—	—	—	—	—	13	5,2	20	5,1
USP/SP	—	—	—	—	—	—	—	—	15	3,8
UFSC	—	—	—	—	9	4,0	17	6,8	34	8,6
UFRGS	—	—	—	—	—	—	—	—	8	2,0
UFMS	—	—	—	—	—	—	—	—	8	2,0
SUBTOTAL	122	100	174	98,3	204	—	223	89	395	99,9
UFPe	—	—	3	1,7	9	4,0	12	4,8	—	—
UNESP	—	—	—	—	14	6,2	13	5,2	—	—
ITA	—	—	—	—	—	—	3	1,2	—	—
TOTAL	122	100	177	100	227	100	251	100,2	395	99,9

Fontes:

* Pesquisa Fundamental e Pós-Graduação

** Avaliação e Perspectivas

*** CAPES

TABELA 6 - Distribuição de Doutores por Área em 1973-1976

ÁREA	1973*		1976**	
	Nº	%	Nº	%
Química Orgânica	60	44,8	71	38,2
Físico-Química	27	20,1	44	23,6
Química Inorgânica	26	19,4	24	12,9
Química Analítica	21	15,7	47	25,3
TOTAL	134	100	186	100

Fontes:

* Pesquisa Fundamental e Pós-Graduação

** Avaliação e Perspectivas

TABELA 7 - Distribuição de Doutores por Ramo em 1985

RAMO	NÚMERO	PERCENTAGEM	
		SUBÁREA	TOTAL
Química Orgânica	90	100	34,0
Produtos Naturais	21	23,3	
Síntese	19	21,1	
Análise Orgânica	11	12,2	
Físico-Química	73	100	27,5
Cinética	13	17,8	
Espectroscopia e Estrutura Molecular	11	15,1	
Química Inorgânica	38	100	14,3
Compostos de Coordenação	13	34,2	
Química Analítica	64	100	24,2
Espectrometria	13	20,3	
Instrumentação	9	14,1	
Cromatografia	9	14,1	
TOTAL	265		100

Fonte: Química Nova, Vol. 2, nº 2, páginas 91 a 93 (1975).

Se a pesquisa química nas universidades brasileiras dá sinais de crescimento e diversificação, fatores considerados bastante positivos, o mesmo não ocorre com as condições nas quais os trabalhos são executados. Por exemplo, no que se refere à instrumentação científica, uma atualização dos levantamentos sobre espectrômetros de ressonância magnética nuclear e de massas do PRONAQ revela que a maioria desses instrumentos foi comprada há mais de dez anos. Alguns modelos já saíram de linha e não contam com assistência técnica adequada ou as peças de reposição necessárias para seu conserto. Ao que tudo indica, a aquisição de equipamento de grande porte foi virtualmente interrompida durante o período 1980-1984, e há grupos com sérios problemas de acesso a aparelhos.

A situação das bibliotecas não é muito melhor. O Programa de Informação em Química Básica e Química Tecnológica (INFOQ) do PRONAQ estabeleceu uma lista de 156 periódicos estrangeiros e 32 obras de referência considerados básicos para a pesquisa em química e engenharia química. Estes, além de serviços automatizados de busca retrospectiva e de disseminação seletiva de informações deveriam estar disponíveis aos pesquisadores brasileiros. Em vista do grande número de coleções incompletas e de superposição nas assinaturas, optou-se por racionalizar as aquisições, voltando o apoio para bibliotecas de maior potencial de utilização. Uma biblioteca nacional de referência e algumas bibliotecas regionais foram selecionadas e apoiadas pelo PADCT. Hoje, doze bibliotecas possuem o Chemical Abstracts completo (mas não necessariamente os índices coletivos); as bibliotecas regionais recebem o Current Contents e/ou Chemical Titles. O Programa de Aquisição Planificada de Periódicos para Bibliotecas de Instituições de Ensino Superior (PAP) – do Programa Nacional de Bibliotecas Universitárias (PNBU) da SEU/MEC, fez uma avaliação dos títulos existentes e iniciou um programa de aquisição e “desaquisição” de acordo com critérios de acesso e situação atual das coleções por região. O programa teve um início promissor, conseguindo completar algumas coleções com o apoio da FINEP. Entretanto, durante o período 1982-1984, várias

universidades não receberam verbas para suas bibliotecas e os recursos passaram a ter um caráter emergencial, servindo apenas para manter as coleções existentes em dia. A situação do acesso às bases de dados também não melhorou muito. Hoje, as bibliotecas ainda estão cheias de "furos" e só a USP e UNICAMP possuem bibliotecas de química razoavelmente completas, enquanto a UFCE, USP/SC e UFRGS proporcionam um acesso às bases de dados internacionais. Vale a pena ressaltar o importante papel do serviço de comutação bibliográfica, o COMUT.

Existem problemas dos mais críticos com relação à importação de reagentes para a pesquisa. Aqui não se trata de um problema financeiro, e sim, de ordem administrativa, relacionado à complexidade e demora na tramitação de documentos. As sucessivas dificuldades com importação têm atrasado, e em alguns casos inviabilizado, importantes projetos de pesquisa.

CAPÍTULO 3

QUÍMICA ORGÂNICA

As primeiras atividades em química no País que tiveram um caráter eminentemente científico foram desenvolvidas em química orgânica. O verdadeiro início da fitoquímica no Brasil deu-se na segunda metade do século passado, no Laboratório Químico do Museu Nacional, onde T. Peckolt, pesquisador formado na Alemanha, desenvolveu um extenso trabalho de classificação de plantas brasileiras. W. Michler, da Escola Politécnica de Zurique, Suíça, conseguiu implantar um bom laboratório de pesquisas, e por um curto período (faleceu em 1889), realizou trabalhos originais com plantas brasileiras. Paul Le Cointe, da Universidade de Nancy, na França, realizou trabalhos sobre a flora amazônica na Escola de Química Industrial do Pará na década de 1920. O próprio professor H. Rheinboldt, iniciador da grande tradição de pesquisa na Universidade de São Paulo, era químico orgânico.

A área de química orgânica é a que reúne o maior número de pesquisadores no Brasil. Seus trabalhos podem ser subdivididos em: produtos naturais, físico-química orgânica, síntese orgânica, fotoquímica orgânica e análise orgânica (Tabela 4). Há uma superposição relativamente grande entre estas áreas.

PRODUTOS NATURAIS

A área que atende pela "Química de Produtos Naturais" é das mais antigas no País, sendo responsável pela implantação de muitos dos atuais grupos que hoje atuam em química orgânica. Embora seja essencialmente voltada para a fitoquímica, a área de "produtos

naturais” compreende também uma componente considerável de síntese e análise orgânica.

No País, esta é uma área caracterizada pelo trabalho em equipe. Compreende funções diferentes como coleta e classificação de amostras (plantas, insetos, animais marinhos) colhidos em diferentes regiões, extração e separação de componentes, derivatização, análises químicas e instrumentais, interpretação de resultados e, em alguns casos, testes de atividade. Essas são executadas por pessoas com diferentes formações, graus de especialização, condições de infra-estrutura e níveis de informação sobre o projeto em seu global. O resultado final do trabalho é freqüentemente uma publicação com vários autores e filiações institucionais, na qual fica difícil avaliar a contribuição de cada um.

A pesquisa em produtos naturais depende muito de recursos avançados de análise orgânica (especialmente RMN e EM), e foi responsável pela implantação da Central Analítica da UFRJ (no NPPN) e na UFCe. Mais recentemente o Laboratório de Tecnologia Farmacêutica da UFPb tem suprido os grupos do Nordeste com análises. A UNICAMP e USP vêm também adquirindo uma razoável capacitação instrumental para a análise de produtos naturais.

A gênese da maioria das atuais atividades de pesquisa em produtos naturais no Brasil pode ser atribuída grupos que, na década de 1950, faziam parte do Instituto de Química Agrícola (hoje CTAA/EMBRAPA), no Rio de Janeiro. Pesquisadores de lá egressos são responsáveis por várias novas gerações de pessoas que trabalham na área, hoje espalhados por quase todo o Brasil.

Os principais grupos que desenvolvem trabalhos em produtos naturais estão nas seguintes organizações: UFRJ (Núcleo de Pesquisa de Produtos Naturais, Instituto de Química e Faculdade de Farmácia), USP (Instituto de Química), UFMG (Departamento de Química), UNICAMP (Instituto de Química e Instituto de Zoologia), UFCe (Departamento de Química Orgânica e Inorgânica).

Trabalhos de bom nível mas de caráter mais isolado são também desenvolvidos na UAm (em colaboração com o Instituto Nacional de Pesquisas da Amazônia), USP/RP (Faculdade de Farmácia) UFPb (Laboratório de Tecnologia Farmacêutica), UFRGS (Faculdade de Farmácia), UFPr (Faculdade de Farmácia), UFPe (Departamento de Antibióticos), CTAA - EMBRAPA e Instituto Butantã. Há ainda grupos em formação ou consolidação nas seguintes universidades: UFSM, UFMS, UFJF, UFOP, UFG e UNESP.

FÍSICO-QUÍMICA ORGÂNICA

A físico-química orgânica foi descrita pela primeira vez como: “a investigação de fenômenos da química orgânica por métodos quantitativos e matemáticos... um dos principais aspectos é o estudo, por métodos quantitativos, dos mecanismos de reações orgânicas e o estudo relacionado do efeito da estrutura do meio reacional na reatividade”. Pode-se dizer, portanto, que a físico-química orgânica estuda, em termos quantitativos e no tempo, os progressos de uma reação. Definida de forma ampla, ela incluiria também a fotoquímica, a química teórica e técnicas espectroscópicas utilizadas no estudo do progresso de uma reação ou outro fenômeno de interesse, além de incluir uma componente sintética apreciável. A físico-química orgânica apresenta as mesmas características e problemas que essas áreas, e a sua distinção das mesmas pode ser uma questão bastante sutil. O principal critério de inclusão de certo tipo de trabalho ou o grupo que o executa no País neste ramo é a seleção regular de seus trabalhos para as Conferências de Físico-Química Orgânica, realizadas a cada um ou dois anos em Florianópolis - SC.

Os primeiros trabalhos de natureza mecanística podem ser atribuídos a grupos na USP, UNICAMP e UFRJ, que se estabeleceram a partir da década de 1960. Aos pesquisadores oriundos desses grupos, somaram-se aqueles vindos do exterior, notadamente os da UFSC, e hoje esse ramo de pesquisa está crescendo bastante no

País.

Os principais grupos estão localizados na UFSC (Departamento de Química), USP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química), IME (Seção de Química), UFRJ (Instituto de Química), UFMG (Departamento de Química) e UFRGS (Departamento de Química).

No Brasil, a área de físico-química orgânica tem uma grande interface com a bioquímica e a química aplicada. Grupos na USP e na UNICAMP realizam trabalhos de alto nível na fronteira com a bioquímica, enquanto trabalhos de natureza aplicada são realizados na USP/SC e USP/RP.

SÍNTESE ORGÂNICA

Há uma dificuldade de classificar os pesquisadores na área de síntese orgânica. Segundo conceitos adotados internacionalmente, há uma clara distinção entre trabalhos preparativos e os de síntese. Esta última tem um objetivo bem definido (nova rota, nova reação) e implica em elementos de criatividade e contribuições metodológicas. Adotando critérios como estes, poucos grupos no Brasil se enquadrariam. Há certo consenso entre os pesquisadores que participaram do II Encontro Brasileiro de Síntese Orgânica, realizado de 04 a 06 de novembro de 1987, em Porto Alegre, RS, que, antes de adotar definições rígidas, deve-se procurar agregar as pessoas que atuam na área.

A síntese resente-se fortemente de deficiências em infraestrutura e especialmente do acesso rápido a certos tipos de reagentes. Há casos inclusive de químicos sintéticos formados nos melhores centros, no exterior, que foram abandonando a síntese, em face das dificuldades encontradas no desenvolvimento de seus trabalhos.

Trabalhos de síntese orgânica já eram realizados na USP, em meados da década de 1950, e ganharam um grande impulso com o Programa CNPq/NAS. Grupos tradicionais também foram estabelecidos na década de 1960, na UFRJ e na UnB. Hoje os principais grupos em atividade nas universidades estão localizados na USP (Instituto de Química), UnB (Departamento de Química), UFRJ (Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais, Instituto de Química e Faculdade de Farmácia), UFSCar (Departamento de Química), UNICAMP (Instituto de Química), IME (Seção de Química), USP/RP (Instituto de Química), UFMG (Departamento de Química), UFCE (Departamento de Química Orgânica e Inorgânica) e UFPe (Departamento de Química).

Ainda em termos de pesquisa química nas universidades, existem grupos em formação nos Institutos de Química da UFRGS e da UFF que já apresentam alguns trabalhos promissores. Cabe lembrar que algumas faculdades de farmácia também desenvolvem trabalhos preparativos. Entre estes estão os da USP/SP, UFRGS, USP/RP e o LTF da UFPb. Trabalhos de boa qualidade também são realizados fora do meio universitário. O INT, o IPqM e o Instituto Butantã devem ser incluídos entre os centros capacitados em síntese orgânica.

A química preparativa serve de base para química fina, e um levantamento da área não estaria completo sem mencionar a CODETEC e seus trabalhos junto às universidades. A CODETEC canaliza recursos para grupos universitários que desenvolvem processos de interesse industrial em escala de laboratório (incluídos na relação anterior). Além desses, institutos de pesquisa estão se capacitando para atuar em química fina, e algumas universidades como a UFRJ, UFMG e UNICAMP já criaram suas comissões de química fina.

ANÁLISE ORGÂNICA

CENTRO DE TECNOLOGIA MINERAL
CETEM / CNPq
BIBLIOTECA

Existe uma componente de análise orgânica na maioria das outras

linhas de pesquisa da área, especialmente as de produtos naturais e de geoquímica orgânica. Alguns grupos aperfeiçoam certos aspectos da metodologia empregada, estando entre estes os de cromatografia na UFRJ (Instituto de Química e Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais), USP/SC (Departamento de Química) e UFPr (Departamento de Química). Outros grupos dispõem de instrumentação moderna, especialmente RMN e EM, e estão se especializando na análise orgânica. Este é o caso do NPPN/UFRJ e do Instituto de Química da UNICAMP, enquanto o Instituto de Química da UFRJ dedica-se especificamente a EM.

A análise orgânica é utilizada de forma sistemática em produtos naturais e geoquímica orgânica. Esta segunda foi inicialmente desenvolvida através do Projeto Xistoquímica, no IQ/UFRJ. A partir de 1983 foram intensificados esses trabalhos, aplicados também na área de petróleo, sendo hoje realizados principalmente no CENPES.

Indubitavelmente, essa é uma área na qual existe uma competência considerável fora das Universidades. O centro mais bem equipado e que conta com a maior e mais capacitada equipe é o CENPES. Há vários outros centros de pesquisas e empresas que estão bem preparados para realizar trabalhos em análise orgânica, como o Centro de Pesquisas da Cia. Cigarros Souza Cruz.

FOTOQUÍMICA ORGÂNICA

O uso da fotoquímica em estudos biológicos foi iniciado por volta de 1965, no Departamento de Bioquímica do IQ/USP. A fotoquímica orgânica foi introduzida, através do Programa CNPq/NAS, nos Institutos de Química da USP e da UFRJ no início da década de 1970. Os trabalhos nestes ramos podem ser de natureza preparativa ou mecanística, admitindo sua inclusão também em síntese orgânica ou físico-química. Há, no entanto, um pequeno grupo de pesquisadores que apresenta regularmente seus trabalhos

A infra-estrutura para pesquisa nesse ramo é razoável, mas uma ampliação da disponibilidade de equipamentos para técnicas rápidas é desejável. Caberia também uma maior atenção para o desenvolvimento de aplicações práticas da fotoquímica como *photo-resists*, fotodegradação de materiais poliméricos, etc. Os grupos que atuam no ramo estão localizados na USP (Instituto de Química), USP/SC (Departamento de Química), UFRJ (Instituto de Química) e USP/RP (Departamento de Química).

FÍSICO-QUÍMICA

A pesquisa em físico-química é, de uma maneira geral, bem mais fragmentada e diversificada do que em outras áreas da química (ver Tabela 4). Seus diversos ramos têm em comum apenas o fato de que investigam-se as propriedades de sistemas relacionando-as com as respectivas estruturas ou, ao contrário, se procura determinar essas estruturas a partir de suas propriedades macroscópicas.

Uma visão da físico-química é de difícil elaboração, devido à crescente inter-relação entre a pesquisa na área e em outras de natureza eminentemente físico-química, mas cujos executantes consideram-se bioquímicos, inorgânicos, etc. A físico-química é caracterizada pela baixa densidade de pesquisadores e, na maioria das áreas de pesquisa, pela falta de massa crítica. As áreas de eletroquímica, química teórica e fotoquímica constituem-se em exceção a esse estado de coisas. São realizadas nessas áreas reuniões periódicas (respectivamente: Encontro Brasileiro de Eletroquímica e Eletroanalítica, Encontro Brasileiro de Química Teórica e Encontro de Fotoquímica e Fotobiologia – todos que extrapolam a Físico-Química em si).

O problema de falta de massa crítica para realizar certo tipo de trabalho afeta também outras áreas. Dados termodinâmicos, especialmente a respeito de diagramas de fases e comportamento de soluções, fizeram falta ao Proálcool, pois pouco se conhecia sobre propriedades de sistemas etanol-água, seu equilíbrio líquido-vapor, comportamento de misturas binárias e ternárias, etc. A própria físico-química se ressentia da falta de pesquisas em dinâmica e trabalhos com *lasers*, cujo emprego no exterior já se tornou rotineiro, mas aqui só são utilizados em espectroscopia.

Os pesquisadores da área consideram a sua crescente interdisciplinaridade, que dificulta a sua conceituação de forma global, a obsolescência de equipamento e a inadequação dos atuais currículos dos cursos de graduação e de pós-graduação em físico-química (estrutura, conteúdo, modo de apresentar, etc.), os principais entraves para o desenvolvimento da físico-química. Deficiência dos serviços de apoio (oficinas, recursos de computação, etc.) agravam ainda mais esse quadro. Não obstante, a área tem mantido um bom nível de produtividade, e há apenas a lamentar o decréscimo em atividades experimentais (alguns equipamentos, a exemplo daqueles utilizados na pesquisa em física, são de alto custo, embora usados para fins muito específicos e por poucas pessoas).

O caso da computação merece um destaque a parte. Esse é um segmento onde os avanços tecnológicos têm sido extremamente rápidos e os pesquisadores brasileiros dificilmente poderão acompanhá-los. Deve-se ressaltar que as necessidades computacionais da química (notadamente as da química teórica) são bastante diferentes das de outras áreas, o que obriga os centros que proporcionam esse tipo de apoio nas universidades a se estruturarem especialmente. Em alguns casos pode ser mais vantajoso equipar alguns grupos de química com "superminis" do que capacitar os centros de computação para atender apenas às necessidades dos pesquisadores da química.

QUÍMICA TEÓRICA

A química teórica representa um dos ramos de investigação que mais cresceu no Brasil nos últimos anos, e hoje reúne o maior contingente de pesquisadores em físico-química. É difícil precisar onde a química teórica primeiro surgiu no País, mas quase certamente foi junto a grupos de física que realizavam cálculos de mecânica quântica. Um destes grupos nasceu no Departamento de Física da UFPe, e outro, no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas. Pesquisas

com espalhamento de elétrons no Instituto de Química da USP formaram também um grupo de químicos teóricos, responsáveis pela criação do grupo na UFSCar no final da década de 1970.

A química teórica é desenvolvida nos seguintes locais: UFPe (Departamento de Química Fundamental), UFSCar (Departamento de Química), UNICAMP (Instituto de Química), UFRJ (Instituto de Química), UFMG (Departamento de Química), CBPF, USP/SC (Departamento de Química), UFF (Instituto de Química), PUC/RJ (Departamento de Química) e no Instituto de Estudos Avançados do Centro Técnico Aeroespacial.

ESPECTROSCOPIA

As atividades em espectroscopia são bastante antigas, os primeiros trabalhos originados dos Departamentos de Física. Contudo, posteriormente, com pesquisadores formados no exterior. Estes representam o segundo maior número de pesquisadores da área e trabalham nos seguintes ramos de espectroscopia:

Espectroscopia Vibracional – UNICAMP (Instituto de Química), USP/RP (Departamento de Química);

Espectroscopia de Terras-Raras – UNICAMP (Instituto de Química), UFPe (Departamento de Química Fundamental), USP/RP (Departamento de Química);

Espectroscopia de RMN – IME (Seção de Química), UNICAMP (Instituto de Química) e USP (Instituto de Química);

Espectroscopia de Impacto de Elétrons – UFRJ (Instituto de Química);

Espectroscopia de Mössbauer – UFMG (Departamento de Química) e CBPF.

ELETROQUÍMICA

A eletroquímica é possivelmente o ramo mais antigo da pesquisa em físico-química no País, tendo suas origens no Instituto de Química da USP em meado da década de 1950. Inclui um número de pesquisadores relativamente grande para a físico-química, mas, em face das suas múltiplas aplicações tecnológicas, pode ainda crescer. Os grupos tiveram formações acadêmicas independentes, mas colaboram bastante entre si. Levantamentos da FAPESP indicam que não se criaram grupos novos desde 1980, mas que os existentes experimentaram um crescimento razoável.

Equipamentos importados são necessários para a pesquisa em eletroquímica. Estes são de custo relativamente baixo, o que permite a sua obtenção através de auxílios relativamente modestos. Por outro lado, sofrem todos os problemas de importação.

Existem diversas aplicações da eletroquímica à química orgânica e analítica, mas há uma deficiência com relação à química inorgânica. Em termos de linhas de trabalho a serem estimuladas, destacam-se: superfícies e interfaces, semicondutores, meios não-aquosos e sais fundidos, eletrocatalise, e conversão e armazenamento de energia.

A pesquisa em eletroquímica está quase totalmente restrita ao Estado de São Paulo e fortemente concentrada na região de São Carlos. Os principais grupos em atividade são: USP/SC (Departamento de Química), UFSCar (Departamento de Química), USP (Instituto de Química), ITA (Departamento de Química), USP/RP (Departamento de Química) e UFSC (Departamento de Química). Adicionalmente, há pesquisadores em atividade nas seguintes instituições: UNESP, UNICAMP, UFRJ, UFAP, UFRN, IPT, INT e CENPES.

OUTROS RAMOS

A pesquisa nos outros ramos de físico-química pode ser subdividida segundo a classificação a seguir:

Termodinâmica – UNICAMP (Instituto de Química) e UFSC (Departamento de Química);

Cinética Química – UFSC (Departamento de Química), UFMG (Departamento de Química), USP/SC (Departamento de Química);

Sistemas Miscelares e Coloidais – UFSC (Departamento de Química), USP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química); UFRGS (Instituto de Química);

Fotoquímica – USP/SC (Departamento de Química), USP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química); UFSC (Departamento de Química);

Dinâmica de Colisões – USP (Instituto de Química), UFSCar (Departamento de Química), UFRJ (Instituto de Química);

Cristais Líquidos – UFSC (Departamento de Química), USP (Instituto de Química);

Biofísica Molecular – UFPe (Departamento de Química Fundamental);

Difração de Raios X – UFMG (Departamento de Química);

Ligação Hidrogênio – USP/RP (Departamento de Química), UFRJ (Instituto de Química);

Simulação – USP/RP (Departamento de Química), UFSC (Departamento de Química);

Combustão e Termoquímica – UFRN (Departamento de Química), UFPa (Departamento de Química).

QUÍMICA INORGÂNICA

O “renascimento” da química inorgânica levou mais tempo para chegar ao Brasil. Até a década de 1960 os trabalhos concentravam-se em química de coordenação e organometálicos, e as novidades eram em termos do metal (a linha de lantanídeos é a mais tradicional e produtiva) ou do tipo de complexo (de fosfatos, por exemplo). Complexos com outros tipos de metais começaram a ser estudados a partir de 1965. O Programa CNPq/NAS introduziu novas linhas de trabalho em reatividade química que hoje se espalharam, principalmente pelo interior do Estado de São Paulo. A cooperação com a França, proporcionada pelo PRONAQ, levou ao aparecimento de novos grupos, em estado sólido e catálise homogênea. Um ramo que está começando a se consolidar é o de bioinorgânica, onde trabalhos sobre reatividade passam a abordar também este importante aspecto.

A química inorgânica tem-se aproveitado bastante da interação com a Física. Exemplos como os da UFPe, USP/SC, UNESP e UFSCar podem frutificar, desde que os químicos possam ir além do seu papel de preparadores de amostras para tomar parte também em trabalhos de caracterização.

A pesquisa em química inorgânica no Brasil segue algumas linhas principais. A Química de Coordenação, particularmente a de complexos de terras-raras, é a mais tradicional, tendo sua origem nos trabalhos dos professores alemães e seus colaboradores. Seus seguidores vêm introduzindo inovações nesses trabalhos, e a USP é hoje a principal responsável por este ramo de pesquisa e sua difusão, pelo interior do Estado de São Paulo e algumas universidades do Nordeste. Uma segunda linha que está começando

a formar gerações sucessivas é a de termoquímica e calorimetria. Essa é desenvolvida principalmente na UNICAMP, sendo também difundida pelo Nordeste. Os trabalhos em reatividade e seus desdobramentos na bioinorgânica, vêm do Programa CNPq/NAS e têm na USP seu principal executor. Um dos participantes desse mesmo programa permaneceu no Brasil realizando bons trabalhos na UFSCar. Há várias outras linhas de pesquisa que foram introduzidas por pesquisadores formados no exterior que ainda não atingiram um volume de trabalhos comparável aos das três anteriormente citadas.

Entre as linhas de pesquisas que estão sendo implantadas através da cooperação com a França estão as de organometálicos, principalmente aqueles voltados para a catálise homogênea, e a de estado sólido/materiais inorgânicos. Deve-se ressaltar que ambas já eram desenvolvidas na UNICAMP, mas ganharam um impulso grande através da cooperação internacional envolvendo a UNESP, USP/SC e UFRGS.

A área conta com Simpósios Nacionais de Química Inorgânica realizados a cada dois anos. O primeiro foi realizado em Araraquara, o segundo em São Paulo, o terceiro foi realizado em Campinas em 1986, e o quarto em 1988, no Rio de Janeiro.

PRINCIPAIS GRUPOS

Os principais grupos que atuam nos diferentes ramos da química inorgânica são os localizados em:

- Química de Coordenação: USP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química), IFCE (Departamento de Química Orgânica e Inorgânica), UNESP (Instituto de Química de Araraquara), USP/RP (Departamento de Química), UFMG (Departamento de Química), USP/SC (Departamento de Química), UFBA (Instituto de Química), UnB (Departamento

de Química), UFRGS (Instituto de Química), UFSM (Departamento de Química) e UFRN (Departamento de Química).

- Termoquímica: UNICAMP (Instituto de Química), UFPb (Departamento de Química) e UFCe (Departamento de Química Orgânica e Inorgânica). Há, também, um início de atividade na UFMS.
- Reatividade: USP (Instituto de Química), UFSCar (Departamento de Química), UNICAMP (Instituto de Química), USP/RP (Departamento de Química), UNESP (Instituto de Química de Araraquara), UFMG (Departamento de Química), PUC/RJ (Departamento de Química).
- Materiais Inorgânicos: UNICAMP (Instituto de Química), UNESP (Instituto de Química de Araraquara), UFPE (Departamento de Química Fundamental), UFSCar (Departamento de Química), PUC/RJ (Departamento de Química), UFRGS (Instituto de Química) e UFAL (Laboratório de Cristalografia e Físico-Química Estrutural). Há um início de atividade também na UFPb e na UEM.
- Espectroscopia e Inorgânica Teórica: UNICAMP (Instituto de Química), PUC/RJ (Departamento de Química), UNESP (Instituto de Química de Araraquara), USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular).
- Eletroquímica: UFSC (Departamento de Química), USP/RP (Departamento de Química), UFPb (Departamento de Química).
- Organometálicos e Catálise Homogênea: UNICAMP (Instituto de Química), UNESP (Instituto de Química de Araraquara), UFSCar (Departamento de Química), USP/RP (Departamento de Química), UFRGS (Instituto de Química).
- Cristalografia: USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular).

. Fotoquímica: UNICAMP (Instituto de Química), UFSCar (Departamento de Química), USP/RP (Departamento de Química) e UnB (Departamento de Química).

. Química do Positrônio: UFMG (Departamento de Química).

Há também atividades de caráter mais isolado, muitas delas voltadas para aplicações tecnológicas, na UFCE, USP, PUC/RJ, UFRJ, UNICAMP, UFRGS e UFPI.

CAPÍTULO 6

QUÍMICA ANALÍTICA

As primeiras aplicações da química analítica no País datam do início do século passado, no Laboratório Químico do Museu Nacional no Rio de Janeiro. Numerosas análises de matérias naturais foram realizadas, e seus diretores foram responsáveis pelos primeiros tratados de química aqui publicados. Um dos mais importantes pesquisadores em química que já trabalhou no Brasil, o Dr. Fritz Feigl, era químico analítico. Embora não lecionasse em universidade (pesquisou cerca de trinta anos no Laboratório da Produção Mineral no Rio de Janeiro), o Dr. Feigl teve uma grande influência sobre os responsáveis pelos dois mais tradicionais grupos de pesquisa acadêmica em química analítica – os da USP e da PUC/RJ, e pela pesquisa em análise orgânica na UFRJ. Além do Dr. Feigl, professores alemães implantaram cursos de alta qualidade nas décadas de 1920 a 1930, e um de seus sucessores no Rio Grande do Sul teve uma longa e produtiva carreira de pesquisador.

Apesar da importância da química analítica para diferentes aplicações e de sua tradição no País, a área parece ter chegado a uma posição próxima da estagnação. O número de orientadores é o mais baixo entre os das áreas tradicionais da química (Tabela 3) e o número de pessoas que ingressa na carreira docente mal substitui aquele das que se aposentam. Este fato admite diferentes interpretações.

A química analítica é introduzida no início dos cursos de graduação. Assim os docentes da área são bastante sobrecarregados com o ensino. Embora haja uma grande procura de cursos de analítica, tanto de graduação quanto de pós-graduação, o aluno raramente segue uma carreira na área por uma série de razões. A

principal talvez seja a falta de acesso à instrumentação. A química analítica é uma das áreas mais prejudicadas pela obsolescência de equipamentos e as universidades já não acompanham o estado-da-arte (o que não é o caso na indústria), e às vezes, mesmo os cursos de análise instrumental são dados sem que o aluno tenha qualquer contato com os equipamentos.

A pesquisa em química analítica, no País, pode ser dividida segundo: métodos eletroanalíticos e espectroanalíticos, métodos de separação, métodos termoanalíticos, métodos radioanalíticos, e instrumentação (que pode incluir todos os acima). Há ainda a quimiometria ou técnicas de tratamento de dados analíticos. Essa é uma área de crescente emprego e é desenvolvida principalmente por físico-químicos. Métodos clássicos como titulometria, gravimetria e técnicas de toque recebem pouca ênfase na pós-graduação, mas são as áreas nas quais a maior parte do ensino de graduação ainda é baseado.

A química ambiental compreende a aplicação de várias técnicas analíticas. A sua metodologia é essencialmente analítica e é tratada aqui conjuntamente, embora faça reuniões em separado.

São promovidos a cada dois anos os Encontros Nacionais de Química Analítica (ENQA). Em 1987 foi realizado o 4º, servindo para reunir as pessoas que atuam na área e acompanhar seus trabalhos. Outras reuniões, como os Encontros Brasileiros de Eletroquímica e Eletroanalítica, o Congresso Latino-Americano de Cromatografia, o Encontro Latino-Americano de Espectrometria de Massas, o Encontro de Usuários de Ressonância Magnética Nuclear e o Encontro de Termoanálise, servem também para este fim, sendo mais específicos no assunto mas abrangentes nas origens dos participantes. Tais eventos refletem bem a atividade de pesquisa em suas respectivas áreas. As Tabelas 8 e 9 relacionam os trabalhos apresentados por ramo de pesquisa e por instituição, servindo para constatar que há casos de estagnação ao lado de mostras evidentes de dinamismo. Na química ambiental, em 1987, foram realizados o

2º Congresso Internacional de Química Ambiental na Bahia e o 2º Simpósio Internacional sobre Sistemas Tropicais Marinhos, no Rio de Janeiro.

TABELA 8 - Química Analítica: Trabalhos apresentados em Congressos Nacionais por Ramo de Pesquisa

TRABALHOS POR RAMO	ENQA				SBPC					
	I	II	III	IV	34º	35º	36º	37º	38º	39º
. Eletroanalítica	23	13	27	25	12	8	10	3	7	13
. Espectroanalítica	27	12	23	27	20	23	14	17	22	31
. Separações	20	16	16	22	7	6	5*	12	15	10
. Termoanálise	1	2	1	7	3	0	1	1	0	2
. Radioanálise (Ind. XRF)	20	11	4	8	9	10	4	6	8	8
. Instrumentação (Ind. FIA)	3	9	14	21	5	0	2	1	4	7
. Química Ambiental	3	5	8	11	1	1	2	0	3	2
. Métodos Clássicos	19	11	2	8	4	2	5	0	13	5
. Educação	5	2	2	4	0	0	0	1	0	1
. Outros	15	8	8	12	5	8	7	4	9	2
TOTAL	<u>136</u>	<u>88</u>	<u>105</u>	<u>155</u>	<u>66</u>	<u>58</u>	<u>50</u>	<u>49</u>	<u>81</u>	<u>81</u>

TABELA 9 - Química Analítica: Trabalhos apresentados em Congressos Nacionais por Instituição.

TRABALHOS POR INSTITUIÇÃO	ENOA				SBPC					
	I	II	III	IV	34 ^a	35 ^a	36 ^a	37 ^a	38 ^a	39 ^a
. USP (M+D)	28	12	6	37	4	9	16	5	9	13
. UNICAMP (M+D)	13	21	33	28	23	8	6	9	14	20
. UFMG (M+D)	2	0	3	6	1	4	4	5	9	1
. PUC/RJ (M+D)	25	21	8	14	10	6	3	1	12	11
. UFBA (M)	9	6	1	4	1	2	3	1	3	1
. USP/SC (M)	0	0	4	13	0	1	0	1	0	1
. UnB (M)	0	1	2	2	1	1	0	0	2	2
. UNESP (Ar) (M)	14	7	2	6	2	2	1	0	3	2
OUTROS	45	20	36	45	24	25	17	23	29	30
TOTAL	<u>136</u>	<u>88</u>	<u>95</u>	<u>155</u>	<u>66</u>	<u>58</u>	<u>50</u>	<u>45</u>	<u>81</u>	<u>81</u>

M - Possui curso de pós-graduação a nível de mestrado

D - Possui curso de pós-graduação a nível de doutorado

ENQA - Encontro Nacional de Química Analítica

SBPC - Reunião Anual da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência. Realizados, respectivamente, em Campinas, Belém, São Paulo, Belo Horizonte, Curitiba e Brasília.

PRINCIPAIS GRUPOS

Os principais grupos que atuam em química analítica estão localizados nas seguintes instituições:

- . Eletroanalítica – USP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química), USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular) e UnB (Departamento de Química).
- . Espectroanalítica – PUC/RJ (Departamento de Química), UNICAMP (Instituto de Química), UFBA (Instituto de Química), USP (Instituto de Química) e UnB (Departamento de Química).
- . Separações – UNICAMP (Instituto de Química), USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular), USP (Instituto de

Química), UFMG (Departamento de Química), UFPr (Instituto de Química), UNESP (Instituto de Química) e PUC/RJ (Departamento de Química).

- . Termoanalítica – USP (Instituto de Química) e UNICAMP (Instituto de Química).
- . Radioanalítica – PUC/RJ (Departamento de Química), UNICAMP (Instituto de Química), USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular).
- . Instrumentação – CENA - ESALQ, USP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química).
- . Química Ambiental – USP (Instituto de Química), PUC/RJ (Departamento de Química), UFBA (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química), UNICAMP (Instituto de Química), UNESP (Instituto de Química de Araraquara) e UFSM (Departamento de Química).
- . Métodos Clássicos – UFBA (Instituto de Química).
- . Quimiometria – UNICAMP (Instituto de Química).

Essa é uma área que tem um forte componente nos institutos de pesquisa e na indústria. Embora os trabalhos sejam, em sua maioria, de caráter rotineiro, há um potencial grande de pesquisa em química analítica em instituições como o CENPES, IPEN, IRD/CNEN, INT, IPT, CIENTEC, CEPED e muitos outros.

CAPÍTULO 7

POLÍMEROS

A pesquisa em polímeros no País teve início em 1968, no Instituto de Química da UFRJ. O grupo se expandiu, constituindo em 1976 o atual Instituto de Macromoléculas (IMA), principal centro na área. No período 1978-81 houve um aumento sensível no número de pesquisadores em polímeros, e em 1981 iniciou-se a implantação de um programa na área, no Instituto de Química da UFRGS, em colaboração com a Universidade de Freiburg, na Alemanha.

Foram formados no País mais de dez doutores e 80 mestres em polímeros, que hoje integram os quadros de diversas universidades, centros de pesquisa e laboratórios de empresas.

PRINCIPAIS GRUPOS

Os principais grupos são: UFRJ (Instituto de Macromoléculas e Programa de Engenharia Química da COPPE), UNICAMP (Instituto de Química), UFSCar (Departamento de Materiais) e UFRGS (Instituto de Química).

A implantação de um programa de Novos Metais pela FINEP atraiu o interesse dos seguintes grupos para a área de polímeros: USP, UFPe, UFPb, UFRN, UCS, UEM e UFMG. O CENPES possui um forte grupo de polímeros e outras empresas estão se organizando.

CATÁLISE

A atividade de ensino e pesquisa em catálise no País ganhou grande impulso com o retorno de pesquisadores formados nos EUA, Alemanha e França, no início dos anos 70.

Foi nessa época que o Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo A. Miguez de Mello - CENPES, da Petrobrás, em colaboração com o Instituto de Química, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - IQ/UFRJ, organizou um curso reunindo três dos maiores expoentes internacionais em catálise.

Concomitantemente, o Programa de Química Brasil-Estados Unidos, formulado pelo então Conselho Nacional de Pesquisas-CNPq e a National Academy of Sciences-NAS, dos EUA, incluiu a catálise entre as áreas escolhidas para atividades de cooperação. Pouco depois o Instituto Militar de Engenharia-IME iniciava um programa de intercâmbio com a Universidade de Paris apoiado pela cooperação técnica francesa.

Os meados dos anos 70 viram malograr os primeiros esforços por parte do CNPq e da Financiadora de Estudos e Projetos-FINEP no sentido de estabelecer um programa integrado na área de catálise. Essa fase, na qual as atividades em catálise estavam sendo estabelecidas, encerrou-se definitivamente com a realização do 6^o Simpósio Ibero-Americano de Catálise, em agosto de 1978.

A partir de um diagnóstico dos grupos que atuavam em catálise, um grupo de pessoas de expressão na área preparou uma proposta de um plano para seu desenvolvimento. Em novembro de 1981, a proposta era submetida aos representantes de 14 grupos identificados nos diagnósticos. A discussão da proposta e uma breve exposição dos trabalhos de

cada grupo e de suas necessidades mais prementes serviram de base para um plano definitivo. Geraram também uma série de recomendações para incentivar a catálise no País, tanto a nível de pesquisa quanto de ensino, em todos os níveis.

O Plano Integrado de Catálise (mais tarde rebatizado de CAT-PRONAQ) foi considerado da mais alta prioridade, recebendo logo o aval do PRONAQ.

No decorrer do ano de 1982, com base nas atividades do PRONAQ, foi proposto um convênio entre o CNPq e o Centre National de la Recherche Scientifique – CNRS da França (um dos poucos países industrializados nos quais uma parte substancial da pesquisa de ponta em catálise é realizada fora do meio empresarial). Esse convênio, assinado no início de 1983, resultou em aumento considerável nas atividades de intercâmbio e constituiu-se em fator importante para o estabelecimento de grupos em catálise homogênea.

PRINCIPAIS GRUPOS

O número de pessoas atualmente trabalhando em catálise a nível de doutor ou mestre está em torno de sessenta. Estima-se que a área pode formar um ou dois doutores e cerca de vinte mestres por ano. A distribuição de orientadores por ramo de pesquisa está na Tabela 4. Os grupos estão localizados nas seguintes instituições:

- . Catalisadores ácido-base - incluem zeolitas, catalisadores para alcoolquímica e alcoilação – IME (Seção de Química), UFRN (Departamento de Engenharia Química), UFRJ (Instituto de Química) e UFPb (Departamento de Engenharia Química).
- . Catálise por metais – inclui a química do C_1 , hidro e desidrogenação – UFRJ (Programa de Engenharia Química da COPPE), UNICAMP (Departamento de

Química), USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular) e IME (Seção de Química).

Catálise Homogênea – inclui as áreas de óleos vegetais e química do C_1 , entre outras – UNICAMP (Instituto de Química), UNESP (Instituto de Química de Araraquara), USP/SC (Departamento de Química e Física Molecular), USP (Instituto de Química) e UFRJ (Instituto de Química).

O CENPES possui o maior grupo de pesquisas em catálise no País, e outros institutos de pesquisa, como o IPT, CEPED e INT, atuam na área. O Instituto de Física da UNICAMP desenvolve trabalhos especializados visando a caracterização de catalisadores.

NÚMEROS PUBLICADOS NA SÉRIE ESTUDOS E DOCUMENTOS

- 01- Quem é Quem No Subsolo Brasileiro (Francisco Rego Chaves Fernandes)
- 02- A Política Mineral na Constituição de 1967 (Ariadne da Silva Rocha Nodari)
- 03- Mineração no Nordeste - Depoimentos e experiências (Manuel Correia de Andrade)
- 04- Política Mineral do Brasil - Dois ensaios críticos (Osny Duarte Pereira, Paulo César de Sá e Isabel Marques.)
- 05- A Questão Mineral da Amazônia - Seis ensaios críticos (Francisco Rego Chaves Fernandes, Roberto Gama e Silva, Ana Maria Botelho da Cunha, Saulo Rodrigues Pereira Filho e Maria Júlia Rocha Marques; Wanderlino Teixeira de Carvalho e Manuela Carneiro; Breno Augusto dos Santos; Armando Alvares Cordeiro e Arthur Luiz Bernardelli; Paulo César de Sá e Isabel Marques.)
- 06- Setor Mineral e Dívida Externa (Maria Clara Couto Soares)
- 07- Constituinte: A nova política mineral (Gabriel Guerreiro, Octávio Elísio Alves de Brito, Luciano Galvão Coutinho, Roberto Gama e Silva, Alfredo Ruy Barbosa, Hildebrando Herrmann e Osny Duarte Pereira.)
- 08- A Questão Mineral na Constituição de 1988 (Fábio S. Sá Earp, Carlos Alberto K. de Sá Earp e Ana Lúcia Villas Bôas.)
- 09- Estratégia dos Grandes Grupos no Domínio dos Novos Materiais (Paulo Sá)
- 10- Política Científica e Tecnológica: no Japão, Coréia do Sul e Israel. (Abraham Benzaquen Sicsú)
- 11- Legislação Mineral em Debate (Maria Laura Barreto e Gildo Sá Albuquerque)
- 12- Ensaio Sobre a Pequena e Média Empresa de Mineração (Ana Maria B. M. da Cunha)
- 13- Fontes e Usos de Mercúrio no Brasil (Rui C. Hasse Ferreira e Luiz Edmundo Appel)
- 14- Recursos Minerais da Amazônia - Alguns dados sobre situação e perspectivas (Francisco R. Chaves Fernandes e Irene C. de M. H. de Medeiros Portela)
- 15- Repercussões Ambientais em Garimpo Estável de Ouro - Um estudo de caso (Irene C. de M. H. de Medeiros Portela)
- 16- Panorama do Setor de Materiais e suas relações com a mineração: Uma Contribuição para implementação de linhas de P & D - (Marcello M. Veiga e José Octávio Armani Pascoal)