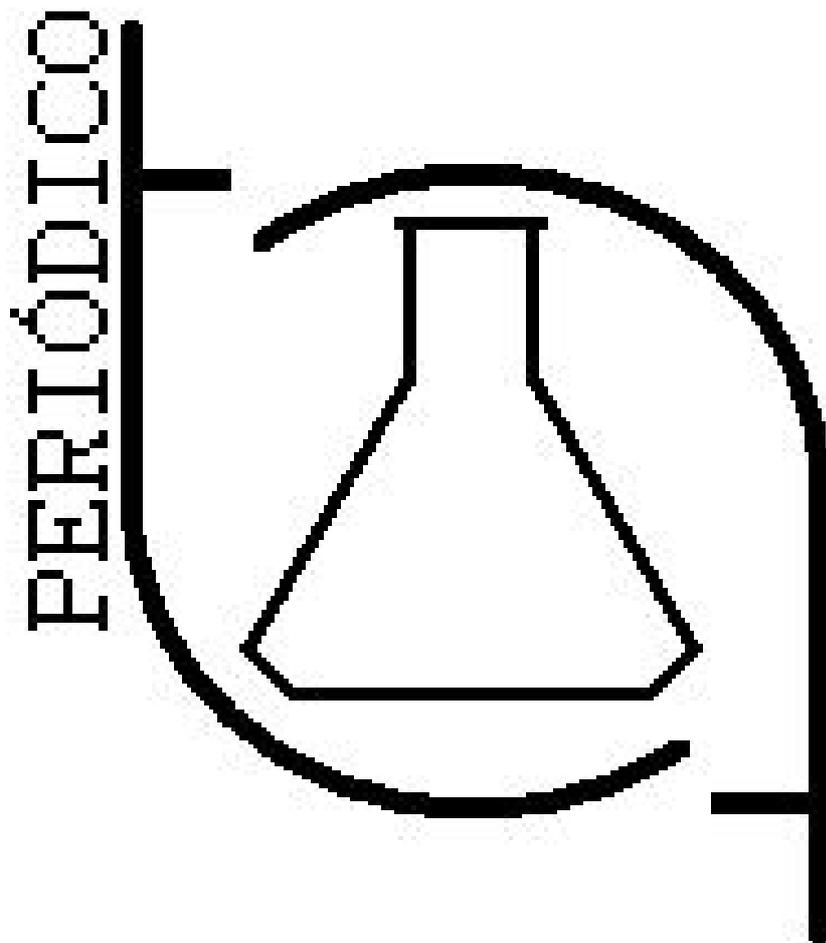


# Tchê Química

Volume 01 - Número 02 - 2004 ISSN 1806-0374



Órgão de divulgação científica e informativa

[www.tchequimica.tk](http://www.tchequimica.tk)

PERIÓDICO  
**Tchê Química**

Volume 01 – Número 02 – 2004

ISSN 1806 – 0374

Órgão de divulgação científica e informativa.

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**

Periódico tchê química: órgão de divulgação científica e informativa [recurso eletrônico] / Grupo Tchê Química – Vol. 1, n. 2 (ago. 2004)- . – Porto Alegre: Grupo Tchê Química, 2004 - Semestral.  
Sistema requerido: Adobe Acrobat Reader.  
Modo de acesso: World Wide Web:  
<<http://www.tchequimica.tk>>  
Descrição baseada em: Vol. 1, n. 1 (jan. 2004).  
ISSN 1806-0374

1. Química. I. Grupo Tchê Química.

CDD 540

**Bibliotecário Responsável**

Ednei de Freitas Silveira  
CRB 10/1262

PERIÓDICO  
**Tchê Química**

Volume 01 – Número 02 – 2004

ISSN 1806 – 0374

Órgão de divulgação científica e informativa.

**Comissão Editorial**

Eduardo Goldani

Gabriel Rübensam

Luis Alcides Brandini De Boni

Rodrigo Brambilla

**Periódico Tchê Química**

ISSN 1806-0374

ISSN 1806-9827 (CD-ROM)

Divulgação *on-line* em [www.tchequimica.tk](http://www.tchequimica.tk)

**Missão**

Publicar artigos de pesquisa científica que versem sobre a Química e ciências afins.

A responsabilidade sobre os artigos é de exclusividade dos autores.

Solicitam-se alterações, quando necessário.

**Correspondências e assinaturas**

[www.tchequimica.tk](http://www.tchequimica.tk)

## Mensagem ao leitor

### De Boni

É sempre complicado escrever alguma coisa para alguém ler, em especial alguma coisa que eventualmente poderá ser lida, como a carta que você está lendo agora. Então, pensando em ampliar a qualidade desta carta brilhante fui buscar inspiração em sofisticados manuais de eletrodomésticos que, em geral, dizem: "Parabéns! Você acaba de adquirir um produto de excelente qualidade...". Todavia, apesar deste produto ser de excelente qualidade, como ele é fornecido de graça, na verdade você não adquiriu ele, então este tipo de frase não ajudou muito.

Insatisfeito com este resultado iniciei uma intensa busca em jornais, revistas (concorrentes), televisão, rádio e até internet e nada. Realmente considerei a possibilidade de não escrever nada.

Então tive que apelar para o meu último recurso, aquilo que seria a minha salvação, o que iria mudar o rumo deste breve texto, a massa de miolos que me revelaria o que dizer. Consultei então o meu maravilhoso cérebro, fonte de todo o meu conhecimento. Após uma intensa pesquisa em uma complexa rede de neurônios e pensamentos fui informado do seguinte: "?" Isso mesmo, "?". Logo eu concluí que não tenho nada de muito especial para dizer, nada que vá revelar os mistérios da vida para você. Então me conformo com esta situação e vou apenas lhe desejar uma boa leitura e agradecer a todas as pessoas que colaboraram para que esta segunda edição do Periódico Tchê Química se concretizasse. Muito obrigado e boa leitura.

**Luis A. B. De Boni.**

**Pesquisador Senior do Grupo Tchê Química.**

---

### Brambilla

Caro leitor do Periódico Tchê Química, o tempo passou e chega em suas mãos mais uma edição do nosso Periódico.

Neste ano que se passou, o site recebeu mais conteúdos e muitas pessoas colaboraram para que ele se tornasse um dos melhores sites de Química do Brasil. Temos recebido elogios de diversas partes do Brasil e tivemos muitos acessos, inclusive de outros países.

Eu gostaria de convidar você que é leitor do nosso Periódico, mas que ainda não se associou ao

site, para tornar-se nosso sócio, pois neste ano muito mais material ainda será adicionado e, sendo sócio, você terá acesso irrestrito a todas as seções do site. Além disso, peço a você, que possui trabalhos interessantes sobre Química ou áreas afins, para que nos envie seus trabalhos para colocarmos no site, ou numa próxima edição do Periódico.

Espero que você faça uma boa leitura e consiga aprender algo novo com esta edição.

**Rodrigo Brambilla.**

**Chefe de Redação do Grupo Tchê Química**

---

### Goldani

É com muita satisfação que estamos apresentando a segunda edição do Periódico Tchê Química, um elo de ligação entre a ciência e você, nosso leitor. Com o passar dos meses trabalhamos forte e com muita seriedade para tornar esta edição ainda melhor e mais profissional do que a primeira, mostrando a nossa preocupação em apresentar aos senhores sempre um material de muita qualidade e compromisso educacional. Sabemos da responsabilidade que temos em contribuir para a divulgação científica no nosso país, mas nem por isso abdicamos de buscar o que tem de melhor para oferecer a você. Como consequência disso,

aumentamos a participação internacional na revista, o que, de certa forma, nos dá mais credibilidade frente aos nossos leitores. Por outro lado, continuamos apoiando a produção científica nacional, pois foi a partir dela que este Periódico chega a sua segunda edição e, fruto disso, consagra-se como o mais novo meio de comunicação científico entre estudantes e profissionais do ramo da Química e áreas afins. Sendo assim, desejamos que a sua leitura seja a mais proveitosa possível e que possa ajudá-lo na compreensão de tudo aquilo que nos cerca nesse complexo mundo da ciência.

**Atenciosamente,  
Eduardo Goldani.**

**Chefe de Edição e Revisão do Grupo Tchê Química.**

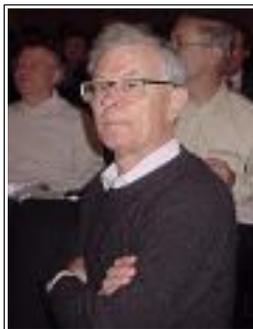
## Índice



### **Entrevista / Interveiw Jerson Kelman**

Diretor-presidente da Agência Nacional de Águas (ANA). Conheça um pouco mais sobre um dos homens que ajudam a projetar o futuro da nação brasileira.

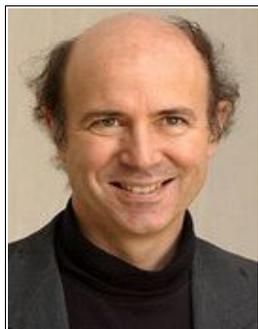
**Página 6**



### **Entrevista / Interveiw Pierre Lehmann – Físico Suíço**

O professor Lehmann é um grande exemplo aos membros da T.Q., e, para nós, é uma grande satisfação apresentar este professor para você.

**Página 10**



### **Artigo / Article**

Professor Dr. Frank Wilczek Feshbach Professor of Physics (MIT – Massachusetts Institute of Technology) Promessa é dívida, e nós pagamos nossas dívidas. Finalmente apresentamos a tão aguardada tradução do artigo **A Origem da Massa**, do professor Wilczek que,

sem dúvida, é um dos cientistas mais interessantes no mundo da Física contemporânea.

**Página 12**



### **Artigo / Article**

**A SHORT HISTORY OF MALAYSIA, PART 1** By Dr Ng Swee Ching  
**Página 23**

**Artigo / Article**  
**THE EDUCATION SYSTEM IN MALAYSIA, PART II** By Dr Ng Swee Ching  
**Página 34**

### **Artigo / Article**

**SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E ESTUDOS TÉRMICOS, VIBRACIONAIS E CONDUTIMÉTRICOS DOS CLORETOS DE PRASEODÍMIO E NEODÍMIO COM A 1,10 – FENANTROLINA**, Débora de Carvalho Lira, Francisco José Santos Lima e Ademir Oliveira da Silva. Departamento de Química – CCET/UFRN - Natal – RN – Brasil.

**Página 24**

### **Artigo / Article**

**SABÕES E DETERGENTES**, Eduardo Goldani  
**Página 29**

### **Artigo / Article**

**AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE DE SISTEMAS CATALÍTICOS NÃO-METALOCÊNICOS NA POLIMERIZAÇÃO DE ETILENO**, Nara R. S. Basso, Cíntia Sauer, Fabiana Fim, Alexander Stello e-mai: nrbass@puccrs.br. PUCCRS: Faculdade de Química. Avenida Ipiranga 6681, prédio 12-A, 90619-900-Porto Alegre-RS.

**Página 36**

### **Artigo / Article**

**COMPUTER IMAGE ANALYSIS OF MALARIAL PLASMODIUM VIVAX IN HUMAN RED BLOOD CELLS**

André von Mühlen, MS - California Polytechnic State University, San Luis Obispo, Contact: andrevm@msn.com

**Página 42**

### **Artigo / Article**

**Catalytic converter: a great allied at polluting gases**, Eduardo Goldani

**Página 52**

### **INSTRUÇÕES PARA**

**PUBLICAÇÃO** INSTRUCTIONS FOR PUBLICATIONS

**Página 53**

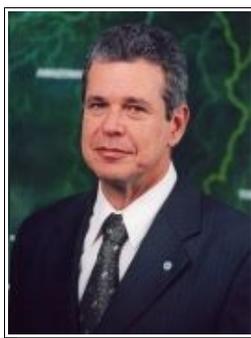
### **AGRADECIMENTOS / THANKS.**

**Página 54**

### **DIVERSOS / MISCELÂNEA**

**Página 54**

## Conheça melhor um dos mais importantes pesquisadores brasileiros JERSON KELMAN



Jerson Kelman nasceu em 1948 na cidade do Rio de Janeiro. Em 1971, formou-se em Engenharia Civil pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) e em 1976 obteve o título de Ph.D em Hidrologia e Recursos Hídricos pela Colorado State University. Jerson Kelman é professor do curso de Pós-Graduação em Engenharia da UFRJ desde 1973, sendo autor de mais de 100 artigos técnicos e de alguns livros, tendo também orientado dezenas de teses de mestrado e doutorado.

O prof. Dr Jerson Kelman assumiu a presidência da Agência Nacional de Águas (ANA) simultaneamente com a sua instalação em janeiro de 2001, desde então, vem desenvolvendo e implantando os principais instrumentos de gestão em bacias hidrográficas consideradas críticas e estruturando a ANA para o exercício adequado de suas atribuições.

Leia atentamente esta ótima entrevista do Prof. Dr Jerson Kelman à Tchê Química e descubra o porquê de o país enfrentar problemas de falta d' água em algumas regiões mesmo tendo o maior potencial hídrico do mundo.

### **O que mudou na ANA e no Brasil durante a sua gestão como presidente?**

A ANA é responsável pela implantação da Política Nacional de Recursos Hídricos e pelo gerenciamento das águas no Brasil, conforme os princípios estabelecidos na Lei das Águas (Lei Nº 9.433, de 08 de janeiro de 1997).

Para o cumprimento de suas atribuições, os desafios têm sido expressivos. Envolvem instrumentos gerenciais complexos e mudanças de comportamento da sociedade, que deve ser conscientizada sobre o uso parcimonioso da água. A tarefa exige a construção de pactos entre diferentes atores sociais envolvidos no uso dos recursos hídricos, para garantir o acesso à água, em qualidade e quantidade adequada a todos os brasileiros.

O empenho da Agência face aos desafios se revela nas ações que vêm sendo desenvolvidas. As prioridades eleitas nos três primeiros anos de funcionamento da ANA se concentraram no desenvolvimento e implantação dos principais instrumentos de gestão em bacias hidrográficas consideradas críticas e na estruturação da Agência para o exercício adequado de suas atribuições.

Alguns êxitos merecem destaque, principalmente no que se refere à descentralização da gestão, com o fortalecimento e o apoio aos comitês de bacia. Houve avanços na implementação da outorga e da cobrança pelo uso dos recursos hídricos.

Tais ações, simbólicas para as dimensões do País, representam mudanças no equacionamento dos problemas hídricos brasileiros. A experiência adquirida será valiosa para iniciar processos semelhantes em bacias onde o uso da água é competitivo.

### **Na sua opinião, se a população brasileira começar, desde já, a poupar água em suas casas isso seria significativo no futuro, considerando que o Brasil é um país agrícola e é na agricultura que realmente se consome muita água (70% da água consumida é usada na agricultura, 22% é usada nas indústrias e somente 8% é para uso doméstico)?**

O Brasil é o país com o maior potencial hídrico do mundo, com 13,7% da água doce. Embora cada brasileiro disponha, em média, de 48.314 metros cúbicos de água por ano, esse valor é bem menor em determinadas regiões, já que o problema está na má distribuição, por exemplo, regiões como Rio de Janeiro e São Paulo estão situadas em trechos de bacias incapazes de suprir sequer a demanda de água para uso doméstico e que, para isso, têm que importar água de locais distantes.

Além disso, mesmo em trechos dessas regiões onde a escassez de água não é tão crítica, não pode ser desconsiderado o fato de que quanto mais água se utiliza para uso doméstico maiores são os volumes gerados de esgotos, o que resulta na necessidade de construção de mais estações de tratamento ou, na falta dessas, na diminuição de disponibilidade pela deterioração da qualidade da água.,

Justifica-se, portanto, instituir programas de uso doméstico racional de água já nos dias de hoje, principalmente nas regiões Nordeste, Sudeste e Sul.

### **O que mudou no Brasil depois da criação da ANA? Quais os poderes da ANA?**

Com a criação da ANA, o Brasil passou a ter uma Agência de Estado responsável por disciplinar a utilização de rios, de forma a evitar a poluição e o

desperdício, para garantir água de boa qualidade às gerações futuras. Sua missão é ser a guardiã dos rios brasileiros.

Do ponto de vista institucional, a criação da ANA trouxe mais segurança aos empreendimentos que têm na água um insumo do processo produtivo e precisam, portanto, de regras estáveis de abastecimento. Em parceria com os comitês de bacia, que são uma espécie de unidades básicas para decisões sobre os recursos hídricos, com representantes de todos os setores usuários, poderes públicos e entidades civis, a Agência vai aplicar dois mecanismos para melhorar o aproveitamento dos rios: a autorização para o uso da água ou para lançar efluentes e a cobrança de quem suja ou polui os rios.

**Qual a real situação do Brasil no problema da falta de água? Quais as regiões que possuem esse problema?**

Quanto ao problema de falta de água, de modo geral, há duas situações no Brasil. A primeira refere-se à poluição dos cursos de água, especialmente nas áreas mais urbanizadas do Brasil. Neste caso, a falta de água é causada sobretudo pelas deficiências no tratamento de esgotos urbanos e diz respeito à qualidade de água. Essa situação é a que ocorre, por exemplo, na Região Sudeste do País. A segunda refere-se à falta de água causada pela escassez propriamente dita. Não há quantidade suficiente e a ação da ANA é dirigida para o aumento da oferta de água, e gerenciamento da demanda. Esse segundo caso é o que ocorre, por exemplo, na região Semi-Árida do Nordeste brasileiro.

**O que está sendo feito para resolver o problema da poluição nos mananciais?**

Em março de 2001, com apenas três meses de funcionamento, a ANA lançou um programa inovador que incentiva os Municípios a implantarem e operarem sistemas de tratamento de esgotos que possibilitem reduzir as cargas de poluição lançadas nos rios e córregos nacionais.

O Programa de Despoluição de Bacias Hidrográficas – PRODES é inovador, não financia obras, mas sim resultados. Consiste na concessão de estímulo financeiro, na forma de pagamento pelo esgoto tratado, concedido a prestadores de serviços de saneamento que investirem na implantação e operação de Estações de Tratamento de Esgotos-ETEs. É um programa de compra de esgotos tratados, no qual recursos do Orçamento Geral da União-OGU são repassados ao prestador de serviços de saneamento que cumprir as metas de despoluição (carga abatida e volume de esgotos tratado) constantes do contrato.

É importante esclarecer que o Comitê de Bacia Hidrográfica participa deste processo, pois é necessário que o Comitê dê o aval no quadro de metas proposto pelo prestador/concessionário do serviço.

O PRODES não é uma operação de crédito e os prestadores de serviços somente têm

acesso a parcelas do mesmo após cada certificação trimestral e após a emissão pela ANA da Notificação de Atendimento às Condições Contratuais (NACC) à Caixa Econômica Federal-CEF. No momento, o PRODES carece de recursos orçamentários e financeiros para operacionalização em escala satisfatória.

**O que é mais importante para evitar o problema da falta de água em futuro próximo: poupar água ou despoluir os rios?**

Penso que as duas ações juntas poderão minimizar o problema de falta de água em um futuro próximo.

**Existem previsões que dizem que a data crítica para o problema da falta de água é o ano de 2025. Qual a sua opinião?**

Esses dados são baseados em projeções de crescimento da população, da demanda, do nível de crescimento do País, entre outras. Não penso que seja possível colocar datas críticas, mas sim trabalhar com planejamento para que o tomador de decisão possa antecipar o problema na sua região e viabilizar uma solução eficaz.

**Existe alguma solução a curto prazo para o problema da seca no agreste brasileiro? Se existe, por que não se faz? O problema é de ordem técnica ou financeira?**

A ANA, em parceria com as entidades integrantes da Articulação no Semi-Árido-ASA, iniciou, em agosto de 2001, o Projeto Demonstrativo - P1MCT - Segurança Alimentar -Cisternas Rurais para Famílias do Semi-Árido, que foi concluído em julho de 2003. O projeto viabilizou a construção de 12.743 cisternas rurais, uma das alternativas para a solução dos problemas da seca na Região do Semi-Árido. A técnica, simples e eficaz, possibilita o armazenamento de água potável por meio da recuperação das águas das chuvas, captadas a partir dos telhados das casas. Além de seu baixo custo, a técnica tem a vantagem de permitir o aproveitamento de águas existentes em seu local de uso, diminuindo as perdas decorrentes do transporte, evitando sua contaminação por manejo inadequado.

**Há anos existem no Brasil leis ambientais que regulamentam o tratamento de água e efluentes lançados nos rios. É obrigação de qualquer indústria ou órgão tratar adequadamente seus efluentes e devolvê-los aos mananciais, no mínimo, nas mesmas condições em que ela foi retirada do manancial. Isso está sendo cumprido? Quem fiscaliza? Qual o motivo da poluição dos rios se existe uma legislação?**

A Lei Nº 6.938, de 1981, sobre a Política Nacional de Meio Ambiente, criou o Sistema Nacional de Meio Ambiente. Durante esses mais de 20 anos de existência, vem sendo realizado pelos

órgãos do SISNAMA, um trabalho tendo como instrumentos principais a fiscalização e o licenciamento ambiental. Muitas indústrias implantaram estações e filtros de tratamento de seus efluentes a partir dessa ação fiscalizadora e outras mudaram suas atitudes e comportamentos para adotarem práticas mais responsáveis. Hoje, o grande fator de poluição das águas é o esgoto sanitário e doméstico, já que poucos municípios investiram em saneamento ambiental, especialmente no tratamento de esgotos e na gestão integrada de resíduos sólidos, e esse é um déficit que precisa ser resolvido. O IBAMA, os órgãos estaduais e municipais de meio ambiente são os responsáveis por tal fiscalização. A existência de uma legislação é condição necessária, mas não suficiente para garantir a despoluição dos rios. Também é necessário o investimento dos governos e das empresas privadas em saneamento ambiental e em tratamento de esgotos e disposição final de resíduos sólidos. O que pode ser impulsionado por maior consciência da população, pela comunicação social e pela pressão para que tais investimentos sejam priorizados.

**O Brasil está se tornando o maior produtor de camarões do mundo. Nos tanques onde os camarões são criados, além da demanda natural de oxigênio usado na respiração dos camarões existem os dejetos e os restos de alimento que não são consumidos e que demandam oxigênio para se decompor. Empregam-se aeradores para renovar o oxigênio da água. Por que não é utilizado um filtro biológico como um sistema hidropônico, por exemplo? Não seria esta uma forma de reduzir a DBO<sup>1</sup> e DQO<sup>2</sup> dos tanques e diversificar a produção das fazendas?**

Para implementar a utilização da tecnologia dos filtros biológicos, ou qualquer outra modalidade de tratamento baseada na digestão anaeróbia, nas fazendas de camarões, seria necessário remover os sedimentos, através de bombeamento, para tratá-los nos filtros, o que seria além de mais trabalhoso, mais caro. A digestão anaeróbia "in situ" nas lagoas poderia levar à redução excessiva ou até mesmo à eliminação do oxigênio dissolvido da água, resultando em prejuízos para a produção de camarões. Por este motivo não é indicado o uso desta modalidade de tratamento neste caso específico. Na hidroponia os aditivos utilizados na água não provocam demanda de oxigênio, tendo em vista que são micronutrientes inorgânicos, não servindo de parâmetro de comparação com a situação encontrada nas fazendas de camarões. Sendo assim, essas alternativas não são adequadas para diversificação da produção nas fazendas.

**Na Califórnia se usa uma irrigação por gotejamento e subterrânea para poupar água. Por que no Brasil ainda é permitido a irrigação**

**por aspersão?**

A escolha do método e do sistema de irrigação não depende apenas da vontade do agricultor, mas também da cultura, do tipo de solo, da topografia do terreno e das condições socioeconômicas, entre outros fatores. Não tem sentido a proibição de um ou outro método. Sistemas de irrigação supostamente mais eficientes quanto ao uso da água, se mal manejados, podem ter fraco desempenho. Pelo fato de, na irrigação por gotejamento, ser molhada apenas a parcela do terreno próximo das raízes, se bem aplicado, pode resultar em economia de água. Entretanto, trata-se de um sistema que não é adequado para todas as culturas. Por exemplo, é inviável, do ponto de vista econômico, a irrigação por gotejamento de culturas de pequeno porte, como o feijão. Nesse caso, são usados outros sistemas de irrigação.

Um outro ponto, é que o gotejamento, quando comparado aos outros sistemas, é de maior custo inicial de implantação e exige alto nível tecnológico dos irrigantes, condições que nem sempre são possíveis.

O que tem que ser estimulado, seja qual for o sistema de irrigação empregado, é que o uso da água seja o mais eficiente possível. Nesse sentido, os instrumentos de outorga e cobrança podem ter um papel fundamental. Por exemplo, nas outorgas emitidas pela ANA nos últimos dois anos, em decorrência de análises técnicas que levam em conta a eficiência da irrigação, conseguiu-se uma redução de aproximadamente 38% no volume anual outorgado por hectare, quando comparado com as outorgas emitidas anteriormente. As outorgas apenas são emitidas se forem considerada bom o índice de eficiências de uso de água. Caso contrário, o requerente é obrigado a reconsiderar o seu pedido.

**O lodo residual das plantas de tratamento de esgotos pode ser usado como fertilizante?**

Pode sim, desde que haja um monitoramento adequado. Alguns compostos como nitrogênio e metais pesados em excesso podem ser prejudiciais ao solo. É claro que, a utilização de biossólidos na agricultura pode ser positiva ambientalmente na maioria dos casos, devido à presença de nutrientes e à redução na demanda de áreas de aterros para disposição final do lodo. Também, por razões sanitárias, deve ser observada a presença de patógenos. Mesmo com um tratamento adequado no que se refere a esses microrganismos, o lodo deve ser utilizado prioritariamente em culturas arbóreas como a laranja, banana, cana-de-açúcar, pupunha e reflorestamento e também em parques e jardins.

**São Paulo, a maior metrópole brasileira, assim como outras grandes cidades, sofre com o crescente aumento da poluição dos mananciais que abastecem a cidade. Os rios, principalmente**

**Tietê e Pinheiros, já se encontram saturados em relação à carga de detritos despejados e, com isso, estão ficando assoreados. Qual a estimativa para o assoreamento total destes rios? Existe alguma perspectiva de solução?**

Hoje em dia há uma preocupação muito grande com a Região Metropolitana de São Paulo no que se refere à poluição de seus cursos de água. O foco principal é o rio Tietê, seguido de perto pelo rio Pinheiros. Já existem algumas ações para melhorar a condição atual, como por exemplo a construção dos interceptores do rio Pinheiros, que estão levando os esgotos para a estação de tratamento de Barueri, o rebaixamento da calha do Tietê, entre outras. O grande problema com relação ao assoreamento, no entanto, recai sobre os resíduos sólidos e a poluição difusa provenientes da urbanização e dos sistemas de drenagem. Neste caso, ações não-estruturais, como fiscalização e conscientização da população, podem ser tão importantes quanto algumas estruturais.

**São Paulo e outras grandes cidades podem vir a sucumbir aos seus próprios detritos?**

A situação atual é realmente preocupante. O que acontece é que as administrações estão tentando solucionar seus problemas, como acontece em Porto Alegre, que tem um bom programa de drenagem, e Belo Horizonte, que está inaugurando estações de tratamento de esgotos para despoluição dos rios. Essas soluções têm mérito e devem ser perseguidas por todas as administrações para que as grandes cidades não sucumbam à sujeira.

**Poderia se utilizar o esgoto doméstico na recuperação de áreas desertificadas, para repor o solo que foi perdido devido à má gestão da agropecuária, como no caso de algumas regiões do Rio Grande do Sul?**

Esta solução pode ser adotada em alguns casos, mas há de se ter monitoramento, como no caso de aplicação na agricultura. Para o caso de reposição do solo, o lodo de esgoto pode ser eficiente, desde que haja um tratamento adequado para controle dos patogênicos e metais pesados principalmente. No que se refere ao esgoto doméstico propriamente dito, já existem alguns locais como Israel, por exemplo, que utilizam este resíduo como insumo para fertirrigação após tratamento preliminar com grades e peneiras e desinfecção. No caso do Brasil, há a necessidade de pesquisas na área, o que seria muito bem-vindo.

**Por que o Brasil não faz um uso mais intenso das fazendas marinhas?**

A ANA não tem a competência expressa para gestão em ambiente marinho, mas sim a Marinha, a Secretaria de Patrimônio da União -SPU, a Secretaria Especial de Aquicultura e Pesca da

Presidência da República - SEAP e os Órgãos Ambientais. No momento, a normatização para o uso das fazendas marinhas está em fase de elaboração, sendo que a SEAP está providenciando o fomento e o ordenamento das mesmas.

**Seria possível fazer uma espécie de Canal do Panamá ou algum sistema parecido com o que esta sendo construído no Egito para irrigação de lavouras aqui no Brasil? Um canal que não fosse necessariamente navegável, mas que fosse usado para levar água doce ou salgada para regiões áridas como o Nordeste?**

A questão a se colocar não seria somente sobre a possibilidade, mas também sobre a viabilidade e adequabilidade do empreendimento, entre outros aspectos, nas condições hidrológicas, econômicas e ambientais existentes. No caso da água doce, está se fazendo, por exemplo, um estudo de transferência de água a partir da calha do rio São Francisco para trechos mais secos da bacia e para outras bacias adjacentes no qual parte da condução se fará por meio de canais.

Por outro lado, embora se careçam de estudos mais abrangentes, sob as condições atuais de nosso país não se justifica captar, recalcar e distribuir grandes quantidades de água salgada para regiões mais secas do interior do Nordeste para uso em irrigação, pois isso implicaria gastos energéticos enormes e exigiria a implantação de grandes estações de dessalinização. Além disso, deveria ser antes avaliado o aproveitamento da água subterrânea disponível na região, cujas reservas são sabidamente expressivas em aquíferos como o Serra Grande, Cabeças etc.

A solução poderia, no entanto, ser adotada para algumas grandes cidades da faixa costeira nordestina, onde a água dessalinizada serviria para atender parte da demanda de uso doméstico nas épocas mais críticas.

**O potencial hidroelétrico do Brasil é muito alto, porém a demanda de energia elétrica está colocando a nossa matriz energética em teste. Por que não é utilizada a energia das marés no Brasil?**

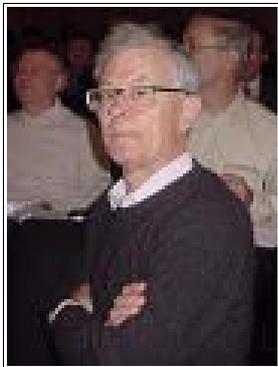
A energia das marés é uma alternativa tecnológica nova, que ainda está em estudo. No Brasil, já se verificou que o Estado do Maranhão apresenta a variação de nível necessária para utilizar essa forma de energia e pode ser um dos locais para se instalar um projeto piloto no nosso País.

**O senhor acredita que a produção de energia elétrica a partir de fontes hídricas no Brasil acabe sendo substituída por outras fontes como nuclear, térmica, eólica etc., para permitir o uso da água na agricultura ou no consumo residencial?**

A alternativa hidrelétrica constitui vocação natural do País, dado o imenso potencial hidráulico ainda a ser explorado. Além disso, continuam a existir aproveitamentos hidrelétricos de custo imbatível por qualquer outra forma de energia

renovável. Por estes motivos, a hidreletricidade continuará a ter participação relevante no planejamento do Governo Federal. Contudo, ao longo dos últimos anos vem-se diversificando a matriz energética brasileira.

## Um homem que vale a pena conhecer



### Pierre Lehmann

O Grupo Tchê Química obteve uma ótima entrevista com o físico e ecólogo Suíço Pierre Lehmann.

Os conceitos e as pesquisas feitas por este professor são de grande aplicabilidade à nação Brasileira, sendo que, dentre elas, podemos citar as pesquisas com biodigestores, captação de água da chuva e preservação de rios.

Por incrível que pareça, os estudos deste Suíço demonstram que é possível fazer pesquisas que causem grandes impactos positivos ao meio ambiente e com o mínimo de recursos dispendidos.

### 1- How old are you? Where did you study? What is your academic formation? Where did you work as a professor?

To start with, I am a physicist. I was born in 1933 and I am now retired. I studied nuclear physics at the Institute of technology of Luusanne. Switzerland and worked for a few years in this field. Then I joined a company named Schlumberger which provides wire line services to oil companies all over the world. This enabled me to work in many countries and with many different people. I also came to realize how polluting the oil business is and started to question the profit gospel of the big companies. In 1971 I returned to Switzerland and started a small engineering office specialising on environmental impact studies, particularly in the field of air pollution. This office still exists and is now run by a female engineer whom I have helped to form in the mathematical modelling of transport and dispersion processes. We also worked on solar energy and water pollution problems.

I realized that it was nonsense to develop non-renewable energies like oil or nuclear and so became active in the anti-nuclear movement in Switzerland. With other people we created "The Association for the Development of Renewable Energies (ADER)". It produced a book in 1997 "L' Energie au futur" (energy in the future) of which I wrote a few chapters.

Concerning the big problem of water pollution, I tried to convince people that it is important first to save water rather than to pollute it and to try hopelessly to clean it afterwards. This made me also a specialist of composting toilets. So, if I want to summarize my career: from nuclear power plants to composting toilets.

Finally I think it is very important to question the way we practice science. The big science of

today (nuclear power, fusion power, biotechnology etc.) are in my view mistaken endeavours. They will only lead to big problems and may well cause the end of humanity. In 1984 with 3 other people I wrote a book questioning the utility of CERN "La Quadrature du CERN". CERN is a big european laboratory in Geneva concerned with high energy particle physics.

It is important to realize that the science of the western world is unable to understand life. Life is infinitely complex. And science confuses complexity with complication. There is no interface between complexity and complication, so different approaches are needed. It is in particular senseless to exclude finality when discussing nature. But this is exactly what science does (postulate of the objectivity of nature).

### 2- You have done several experiments with the recycling of organic materials in your house. Which were the experiments that you considered the most occurred? Why?

In my house we recycle kitchen wastes and human body wastes into compost which can then be used in the garden. In my view it is very important that everybody learns how to compost organic materials. It is as important as to know how to read and write.

### 3- You used to catch the water of rain to use it for ends less noble than the human consumption, as to wash clothes, to water plants among others things. Was difficult for you Professor, living in Switzerland, a country that has one of the best systems of water treatment in the world, to convince people that your principles were correct? That they can in fact reduce the damages to the ambient?

Rainwater is used for all purposes including drinking. I do not agree that Switzerland has a good water treatment system. Indeed the federal law on water protection is silly because it has made sewage pipes and water treatment plants compulsory. If we want to solve the water pollution problem, we must remain as decentralized as possible.

**4- Which is the rock that you use to filter the water of rain? How long is the useful life time of this rock? After the water is filtered still remained some type of impurity or it's already good to be consumed?**

The rock I used for some time to filter rainwater was made of compressed volcanic ashes. It came from the Island of Lanzarote and was given to me by a man I had helped with water hyacinths. The water filtered in this way is perfect drinking water. But even without filtering you can drink rain water. That's what we do.

**5- Speaking on power plants, you possess a foto-cells system on your house. Which factors had led you opt for the solar energy instead of the aeolian one?**

Where I live there is very little wind so photovoltaics make more sense.

**6- You stored the energy of the foto-cells in batteries. How long is the useful life time of the batteries that used you? After the end of the life of its batteries, which is the destination of them?**

Batteries can last a long time (10 years or more) if they are used correctly. This means that they must have a sufficient capacity so as to avoid too deep discharge and drop of potential. A 12 volt battery should remain at 13 or even 13.5 volt. As far as I know , batteries can be recycled but I don't know where this is done.

**7- How about your incredible system of treatment of domestic sewer . How many time does it functioning, or for how many time it functioned? Did it gave any problem? Someone have ever got sick for cause of it?**

Nobody ever got sick because of our

\* Para saber mais sobre Pierre Lehmann, você pode assistir aos documentários que são exibidos na TV2 Guaíba de Porto Alegre.

A bibliografia do professor Lehmann ainda não foi traduzida para o português, porém existem artigos dele em Inglês, Francês e Alemão.

Pierre Lehmann  
Route de Chamby 5  
CH – 1822 CHARNEX  
Switzerland

sewage water. Since we use a composting toilet there is no fecal component in this water. Besides the composting toilet saves a lot of water which simplifies the sewage problem.

**8- You use 4 types of plants to filter the domestic sewer. What factors had taken you to choose these plants? Is necessary to do some chemical treatment in the water after it have been clean for the plants?**

I tried a few plants to help clean up sewage waters out of my septic tank: Eichornia crassipes ( water hyacinth ), Miscanthus robustus and scirpus lacustris. But finally these plants are not really necessary if you have a soil in which to infiltrate water. Soil is the best treatment plant you can get, much better than any mecano-biological treatment plant. But the amount of water has to be reasonable. This again speaks for decentralisation.

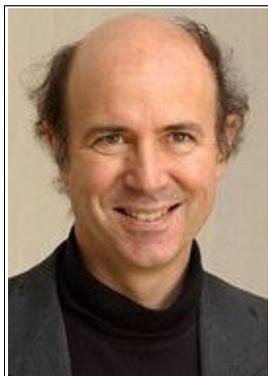
**9- In your opinion, what are the three bigger scientific contributions (in the ambient field) that you have done? How do you hope that they'll help to improve the future?**

The best I did was to denounce the silly approach to water pollution consisting in making water dirty and to clean it afterwards. Water should not be used to remove wastes. Water must be respected since life depends on it. As far as my scientific achievements are concerned, I think that some of the mathematical models I made to simulate the transpirt and dispersion of air pollutants have been quite helpful. But this is a technocratic exercise. The real problem is that we should not introduce pollutants in the air. To pollute the air we breathe makes no sense in the long term. In this respect, the biggest catastrophies were the invention and uncontrolled development of the automobile and the aircrafts.

My view of the future is that we will be faced with a collapse of the silly economic system which is now in the process of globalization. It cannot last very long. Those who will survive the collapse will have to turn to localized economies and replace competition by collaboration and conviviality. It may be a dream but we need utopias to get through the havoc created by modern science and economy. I hope the above answers at least part of your questions. I am of course interested in your comments and wish you a pleasant time.

# A Origem da Massa

Frank Wilczek



Trabalhar atualmente na fronteira da física moderna geralmente envolve conceitos e condições extremas. Falamos de campos quânticos, entrelaçamento, ou supersimetria, analisamos o ridicularmente pequeno, ou conceitualizamos o incompreensivelmente grande. Assim como Willie Sutton popularmente explicou que, ele assaltava bancos porque “é onde o dinheiro está”, nós fazemos estas coisas porque “é onde o Desconhecido está”. Contudo, é de fato incrível e encantador que, ocasionalmente, este sofisticado trabalho dá respostas a questões ingenuas sobre coisas familiares. Aqui, eu gostaria de descrever como meu próprio trabalho sobre as forças subnucleares, o mundo

dos quarks e glúons, emite uma nova e brilhante luz sobre esta questão quase ingênua: Qual a origem da massa?

## A Massa tem uma Origem?

Uma questão que gramaticalmente faz sentido não garante que seja passível de resposta, ou mesmo que seja coerente.

O conceito de massa é uma das primeiras coisas que discutimos com meus calouros da cadeira de mecânica. A mecânica clássica é, literalmente, impensável sem ela. A segunda lei da ação e reação de Newton diz que a aceleração de um corpo é dada dividindo-se a força que age sobre ele por sua massa. Sendo assim, um corpo sem massa não saberia como mover-se, porque você teria uma divisão por zero. Também, na lei da gravidade de Newton, a massa de um objeto influencia a resistência da força que ele exerce. Ninguém pode desenvolver um objeto que gravite, fora do material que não gravita, portanto você não pode desfazer-se da massa sem se desfazer da gravidade.

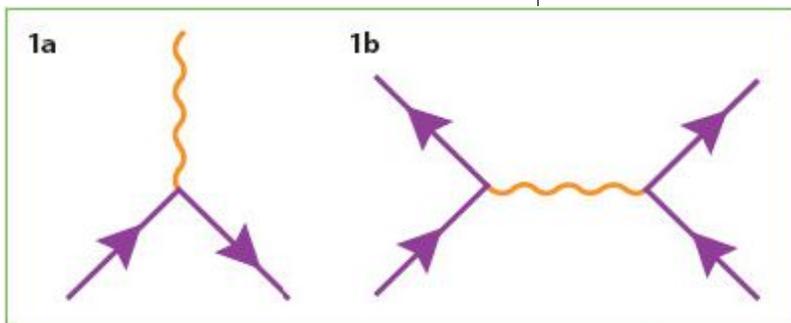
Finalmente, a característica mais básica da massa na mecânica clássica é que ela é mantida. Por exemplo, quando você une dois corpos, a massa total é apenas a soma das massas individuais. Esta pressuposição está tão profundamente arraigada que não foi sequer formulada explicitamente como uma lei. (Embora eu a ensine como a Lei Zero de Newton). No total, na estrutura Newtoniana é difícil imaginar o que constituiria uma “origem da massa”, ou mesmo o que esta frase possivelmente significaria. Nesta estrutura, massa é apenas o que ela é – um conceito primário.

Os últimos desenvolvimentos em física fazem o conceito de massa parecer menos irreduzível. A famosa equação de Einstein  $E=mc^2$  da teoria especial da relatividade, escrita deste modo, delata o prejuízo de que deveríamos expressar energia em termos de massa. Mas não podemos escrever a mesma equação na forma alternativa  $m=E/c^2$ . Quando expressa desta forma, ela sugere a possibilidade de explicar a massa em termos de energia. Einstein estava consciente desta possibilidade desde o início. Certamente, seu artigo original de 1905 é intitulado “A inércia de um corpo depende de seu conteúdo de energia?”, e ele derivou  $m=E/c^2$  e não  $E=mc^2$ . Einstein pensava sobre física fundamental, não em bombas.

## EDQ e CDQ em Figuras

(Figuras 1A, 1B, 1C e 1D)

O conteúdo físico da Eletrodinâmica Quântica (EDQ) é resumido no algoritmo que associa a amplitude da probabilidade



com cada um de seus grafos de Feynman, descrevendo um possível processo em termos de tempo. Os grafos de Feynman são construídos pela junção dos eixos, convencionalmente chamados vértices de interação, na forma mostrada na Figura 1a.

A linha sólida descreve a linha-geral de uma partícula carregada eletricamente, e a linha ondulada formando um vértice, a linha geral de um fóton. Conectando os eixos juntos podemos descrever processos físicos tais como a interação entre elétrons, como mostra a Figura 1b. A cromodinâmica quântica (CDQ) pode ser resumida de forma similar, porém com um conjunto mais elaborado de ingredientes e eixos.

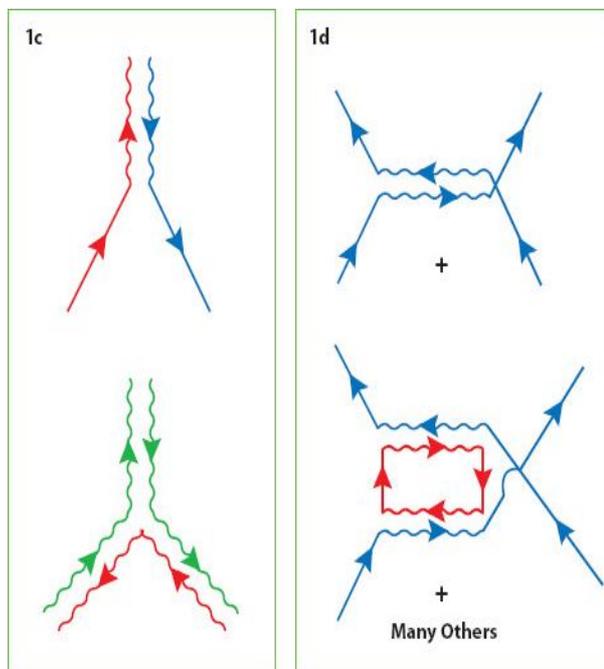
Existem três tipos de cargas, chamadas de cores. Os quarks se parecem com elétrons em suas propriedades mecânicas (tecnicamente, elas são fermions de spins  $\frac{1}{2}$ ), mas suas interações são um tanto diferentes, por elas carregam uma unidade de carga de cor. Os quarks vêm em vários sabores – u, d, s, c, b, e t – assim temos **u u u d d d e** e assim por diante.

Apenas o **u** e o **d**, que têm massa muito pequena, são importantes em um assunto comum. Os outros são pesados e instáveis. Os glúons se parecem com os fótons em suas propriedades mecânicas (tecnicamente, eles são bosons de 1 spin sem massa), porém suas interações são bem diferentes. Existem oito tipos diferentes de glúons coloridos, que respondem a, e mudam as cargas coloridas dos quarks com que eles interagem. Um eixo típico para uma interação quark/glúon é mostrado na Figura 1c, junto de um eixo para a interação glúon-glúon. Este último não tem análogo na EDQ, porque o fóton não transporta uma carga elétrica. A liberdade assintótica, e todas as diferenças drásticas entre como partículas com cargas de cor ou sem cor são observadas para comportarem-se, originarem-se finalmente destas novas interações glúon-glúon. Em princípio podemos tentar usar os diagramas de Feynman para calcular a interação quark-quark, como mostrado na Figura 1d. Mas, ao contrário na EDQ, na CDQ não são poucas as contribuições de gráficos contendo muitos eixos, e

este método não é prático.

Nos aceleradores de partículas modernos, torna-se ativo. Por exemplo, no Collider Large Electron Positron (LEP), no laboratório CERN perto de Genebra, um feixe de elétrons e anti-elétrons (positrons) foram acelerados a uma grande energia. De forma potente, magnetos especialmente projetados, controlaram as trajetórias das partículas, e causaram a circulação delas em direções opostas em torno do grande anel de armazenamento. As trajetórias destes feixes

interseccionaram-se em poucas regiões de interação, onde as colisões poderiam ocorrer. [Após mais de uma década de operações produtivas, na qual cientistas do MIT tiveram um papel de liderança, a máquina de LEP foi desmontada em 2000. O caminho estava sendo aberto para o Large Hadron Collider (LHC), que usará o mesmo túnel. O LHC colidirá prótons ao invés de elétrons, e operará a uma energia muito maior. Passado é passado]. Quando ocorrer uma colisão entre um elétron de alta-energia e um positron de alta-energia, observamos que muitas partículas emergem deste evento. [Veja Figuras 2a e 2b]. A massa total destas partículas pode ser milhares de vezes a massa do elétron e positron originais. Deste modo a massa tem sido criada, fisicamente, da energia.



## O que importa para a matéria

Tendo sido convencidos que a questão da origem das massas deveria fazer sentido, vamos agora entrar em combate com ela, de uma forma concreta que leva a matéria ordinária.

A matéria ordinária é feita de átomos. A massa dos átomos está esmagadoramente concentrada no seu núcleo. Os elétrons em torno são, é claro, cruciais para discutir como os átomos interagem um com os outros – e assim para a química, biologia, e eletrônica. Porém, eles proporcionam menos do que uma parte da massa em milhares.

O núcleo, que proporciona a “parte preciosa” da massa, é concentrado de prótons e nêutrons. Tudo isso é familiar, a história está bem estabilizada, datando mais de setenta anos atrás ou mais.

Mais novo, e talvez menos familiar, porém atualmente não tão estabilizado, é o próximo passo: prótons e nêutrons são formados de quarks e glúons. Então a maior parte da massa da matéria pode ser constituída, finalmente, de quarks e glúons.

### CDQ: O que é ?

A teoria dos quarks e glúons é chamada de Cromodinâmica Quântica, ou CDQ. CDQ é a generalização da Eletrodinâmica Quântica (EDQ). Para uma boa descrição da eletrodinâmica quântica, escrita por um bom graduando do MIT, eu recomendo fortemente *EDQ: A Estranha Teoria dos Elétrons e Luz*, por Richard Feynman.

O conceito básico da EDQ é a resposta dos fótons a uma carga elétrica. A Figura 1a mostra um esboço espaço-tempo do processo do núcleo. A Figura 1b mostra como ela pode ser usada para descrever o efeito de uma carga elétrica sobre outra, através da troca de um fóton “virtual”. [Um fóton virtual é aquele que consegue ser emitido e absorvido sem nunca haver tido uma vida significativa dele próprio. Assim, ele não é uma partícula que você pode observar diretamente, porém pode ter efeitos sobre coisas que você observa.] Em outras palavras, a Figura 1b descreve as forças elétricas e magnéticas!

Desenhos como esses, chamados grafos de Feynman, podem parecer rabiscos infantis, mas sua aparência ingênua é enganosa. Os grafos de Feynman estão associados a quais regras matemáticas definitivas e especificam como pode ocorrer o processo. As regras para os processos complexos, talvez envolvendo muitas partículas carregadas, reais e virtuais, e muitos fótons, reais e virtuais, são formadas de um modo completamente específico e limitado do processo do núcleo. É como brincar de construir com Tinker Toys. As partículas são tipos diferentes de bastões que você pode usar, e o processo do núcleo traz os eixos para unirem-se a elas. Neste caminho, todo o conteúdo das equações de Maxwell para as ondas de rádio e luz, a equação de Schrödinger para átomos e química, e a mais refinada versão de Dirac, incluindo o spin – tudo isso, e mais, é codificado fielmente na onda [Figura 1a].

Sob este nível mais primitivo a CDQ é muito parecida com a EDQ, porém maior. Os grafos parecem similares, e as regras para avaliá-los são similares também, mas há muito mais tipos de bastões e eixos. Mais precisamente, enquanto existe apenas um tipo de carga na EDQ – chamada, carga elétrica – a CDQ tem três tipos diferentes de carga. Elas são chamadas cores, por nenhuma boa razão. Podemos nomeá-las vermelho, branco, e azul; ou alternativamente, se quisermos facilitar o desenho, e evitar as cores da bandeira da França, podemos usar vermelho, verde, e azul.

Cada quark tem uma unidade com uma das cargas coloridas. Além disso, as

quarks têm “sabores” diferentes. As únicas que desempenham um papel na matéria comum são de dois sabores chamados  $u$  e  $d$ , para cima e para baixo. [É claro, os “sabores” não têm a ver com o sabor das coisas. E, estes nomes para  $u$  e  $d$  não se relacionam com qualquer conexão real entre sabores e direções. Não me culpe; quando eu tiver a chance, darei às partículas nomes dignificados, soando cientificamente, como axion e anion.]

Existem quarks de  $u$  com uma unidade de carga vermelha, quarks de  $d$  com uma unidade de carga verde, e assim por diante, para seis possibilidades diferentes, todas juntas. E, ao invés de um fóton que responde a carga elétrica, a CDQ tem oito glúons coloridos que podem também responder a cargas de cores diferentes, ou mudar uma para a outra.

Assim, há uma grande variedade de feixes, e existem também muitos tipos diferentes de eixos que os conectam. Parece que as coisas poderiam tornar-se terrivelmente complicadas e bagunçadas. E assim poderiam, não fosse pela simetria sobreposta da teoria.

Se você intercambiar o vermelho com o azul em toda parte, por exemplo, você ainda deve ter as mesmas regras. A mais completa simetria permite misturar as cores continuamente, formando fusões, e as regras devem ser expressas, as mesmas, tanto para fusão quanto para as cores puras. Não serei capaz de fazer justiça com os matemáticos aqui, é claro. Mas o resultado final é notável, e fácil de convir: há um e apenas um caminho para estabelecer regras para todos os eixos possível, para que a teoria seja expressa totalmente simétrica. Intrincada ela pode ser, mas não bagunçada.

Com esse conhecimento, a CDQ é fielmente codificada em ondas como a Figura 1c, e a força entre as quarks emergem das ondas como na Figura 1d. Nós temos regras definitivas para prever como os quarks e glúons comportam-se e interagem. Os cálculos envolvidos na descrição de processos específicos, como a organização de quarks e glúons em prótons, podem ser bem difíceis de enfrentar, porém não há ambiguidade sobre o resultado. A teoria é tanto certa quanto errada – não há o que esconder.

## Como sabemos que está certo

O experimento é o último árbitro da verdade científica. Existem muitos experimentos que testam os princípios básicos da CDQ. A maioria deles necessitam ainda uma análise sofisticada, basicamente porque não conseguimos ver sob as coisas simples, os quarks e glúons, diretamente. Porém, existe um tipo de experimento que chega muito perto disso, e é o que eu gostaria de te explicar agora.

Estaremos discutindo o que foi observado na LEP. Mas, antes de entrar em detalhes, eu gostaria de revisar um ponto fundamental sobre a mecânica quântica. De acordo com os princípios da mecânica quântica, o resultado de uma colisão individual é imprevisível. Podemos, e vamos, controlar a energia e os spins dos elétrons e positrons precisamente, tão precisamente que o mesmo tipo de colisão ocorre repetidamente; a respeito disso, surgem resultados diferentes. Repetindo muitas vezes, podemos determinar as probabilidades para resultados diferentes. Estas probabilidades codificam a informação básica sobre as entrelinhas das interações fundamentais; de acordo com a mecânica quântica, elas contém *todas* as informações significantes.

Quando examinamos os resultados das colisões em LEP, descobrimos que existem duas classes gerais de resultados. Cada qual acontece metade das vezes.

Em uma classe, o estado final consiste de uma partícula e sua antipartícula movendo-se rapidamente na direção oposta. Estas poderiam ser um elétron e um antielétron ( $e^-e^+$ ), um múon e um antimúon ( $\mu^- \mu^+$ ), ou um tau e um antitau ( $\tau^- \tau^+$ ), os pequenos superscripts denotam sinais de suas cargas elétricas, que são todas da mesma magnitude absoluta. Estas partículas, coletivamente chamadas leptons, são todas bem similares em suas propriedades.

Leptons não transportam cargas coloridas, então suas principais interações ocorrem com os fótons, e assim seu comportamento deveria ser governado pelas regras da EDQ. Isto é refletido, em primeiro lugar, na simplicidade do seu estado final. Uma vez produzido, qualquer uma destas partículas poderia – na linguagem dos grafos de Feynman – anexar um fóton usando um eixo de EDQ, ou alternativamente, em termos físicos, radiar um fóton. A junção básica de fótons a uma carga de unidade, contudo, é francamente pobre. Portanto, cada anexação é prevista para reduzir a probabilidade do processo ser descrito, e assim o caso mais usual é sem anexação.

De fato, o estado final  $e^-e^+ \gamma$ , incluindo um fóton, ocorrem, com uma taxa em torno de 1% do  $e^-e^+$  comum (e similarmente para os outros leptons). Estudando os detalhes destes eventos

### Figura 2a e 2b

#### Real Jets

*These are pictures of the results of electron-positron collisions at LEP, taken by the L3 collaboration led by Professors Ting, Becker, and Fisher. The alignment of energetic particles in jets is visible to the naked eye.*

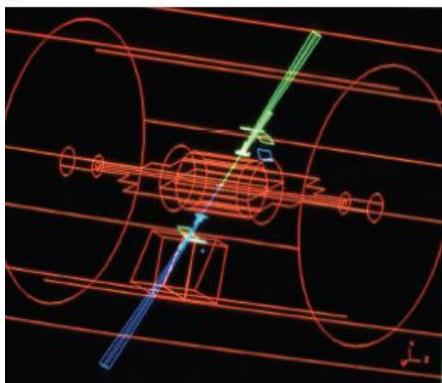
### Figura 2c e 2d

*Conceptual Jets These diagrams represent our conceptual model of the deep structure beneath jet production as it is observed. Electrons and positrons annihilate into "pure energy"*

*(a virtual photon, actually), which materializes into a quark-antiquark pair. The quark and antiquark usually dress themselves with soft radiation, as described in the text, and we observe a twojet event.*

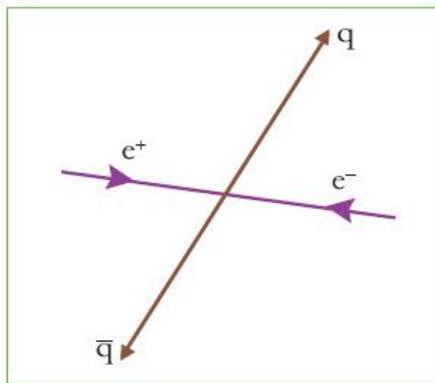
*About 10% of the time, however, a hard gluon is radiated. Then quark, antiquark, and gluon all dress themselves with soft radiation, and we see three jets. Figures 2c and 2d have been drawn to parallel the geometry of the observations shown in Figures 2a and 2b. (N.B. To keep things simple, I have not tried to maintain the full color scheme from Figure 1.)*

2a

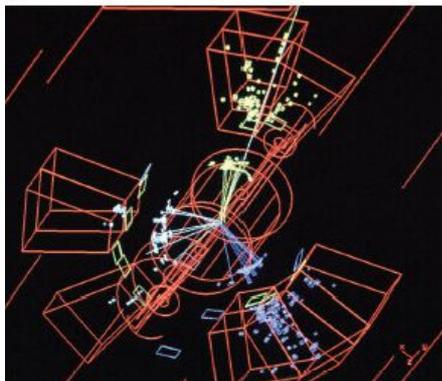


Courtesy L3 at CERN

2c

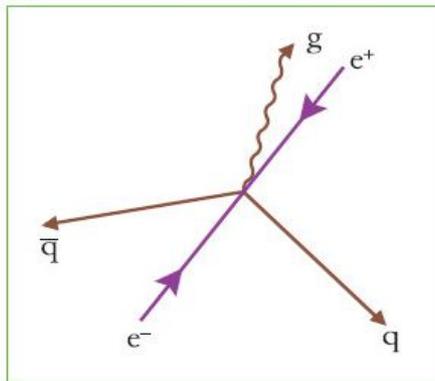


2b



Courtesy L3 at CERN

2d



De 3 partículas, tais como a probabilidade do fóton ser emitido em diferentes direções (o “modelo antena”) e com energia diferente, podemos conferir todos os aspectos de nossa hipótese para o eixo. Isto proporciona uma forma maravilhosamente direta e incisiva para checar o fundamento do bloco de construção básico conceitual onde construímos a EDQ. Podemos então nos dirigirmos aos casos extremamente raros (0,1%) onde dois fótons foram radiados, e assim por diante.

Para futuras referências, vamos chamar esta primeira classe de resultados de “eventos de EDQ”.

A outra classe geral de resultados contém uma classe inteiramente diferentes de partículas, e é de algum modo, muito mais complicada. Nestes eventos o estado final contém tipicamente dez ou mais partículas, selecionadas de um menu de pions, rho mesons, prótons e antiprótons, e muito mais. Estas são todas partículas que, em outras circunstâncias, interagem fortemente umas com as outras, e são todas construídas de quarks e glúons. Aqui, elas tornam um buffet grego e o alfabeto do Latin uma moleza. É tanta desordem que os físicos têm desistido muito mais de tentar descrever todas as possibilidades e suas probabilidades em detalhes.

**“É tanta desordem que os físicos têm desistido muito mais de tentar descrever todas as possibilidades e suas probabilidades em detalhes.”**

Por sorte, contudo, alguns padrões comuns emergem se nós mudamos nosso foco, de partículas individuais, para o fluxo global de energia e momentum.

Na maior parte do tempo – em torno de 90% dos casos – as partículas emergem todas movendo-se em qualquer uma das duas direções possíveis, opostas uma a outra. Dizemos que há jatos back-to-back. (Aqui, por agora, o jargão científico é tanto brilhante e apropriado). Em torno de 9% das vezes, encontramos fluxos em três direções; em torno de 0,9% das vezes, quatro direções; e por isto somos deixados com uma pequena lembrança dos complicados eventos que são difíceis de analisar desta maneira.

Chamarei a segunda classe geral de resultados de “eventos de CDQ”. Os eventos de CDQ representativos de 2 jatos e 3 jatos, assim como são normalmente observados, são mostrados na Figura 2.

Agora se você convergir sua visão um pouco, descobrirá que os eventos da EDQ e os da CDQ começam a se tornar um pouco similares. De fato, o padrão do fluxo de energia é qualitativamente o mesmo em ambos os casos, qual seja, pesadamente concentrado em poucos jatos curtos. Existem duas diferenças principais. Uma, relativamente trivial, é que múltiplos jatos são comuns na CDQ do que na EDQ. A outra é muito mais profunda. É que, é claro, nos eventos da EDQ os jatos são apenas partículas únicas, enquanto nos eventos da CDQ os jatos são sprays de várias partículas.

Em 1973, enquanto eu era um estudante de graduação, trabalhando com David Gross em Princeton, descobri a explicação deste fenômeno. Nós tomamos por base que as diferenças mais profundas entre o comportamento básico observado dos leptons (baseado na EDQ) e as partículas fortemente interativas deveriam indicar que as partículas fortemente interativas são também no final descritas por uma teoria simples, e baseada em regras, com palitos e eixos. Em outras palavras, nós convergimos a visão.

Para deixar nossa figura simplificada dos eventos da CDQ em harmonia com as obserações, nós contamos com uma descoberta teórica que eu descreverei momentaneamente, o que batizamos liberdade asintótica. (Por favor, note que nosso

termo não é “bonito”). Geralmente, nossa descoberta da liberdade asintótica precedeu estes experimentos específicos, então fomos capazes de prever os resultados destes experimentos antes que eles fossem executados.

De um modo histórico, nós descobrimos a CDQ e a liberdade asintótica tentando aprender a lidar com os experimentos “escalares” do MIT-SLAC feitos em Stanford Linear Collider nos anos 60, nos quais Jerome Friedman, Henry Kendall, e Richard Taylor venceram o Prêmio Nobel em 1990. Visto que nossas análises dos experimentos escalares usando a CDQ foram (necessariamente) mais complicados e indiretos, eu decidi focar aqui nos últimos experimentos envolvendo jatos, porém mais simples de entender.

O conceito básico da liberdade asintótica é que a probabilidade de um quark ou glúon, que se mova rápido, radiar parte de sua energia de maneira que outros quarks e glúons dependam se esta radiação é “forte” ou “fraca”. A radiação forte é a radiação que envolve uma deflexão substancial da partícula que irradia, enquanto a radiação fraca é a radiação que não causa tal deflexão. Assim, a radiação forte muda o fluxo de energia e o momentum, enquanto a radiação fraca meramente a distribui entre as partículas adicionais, movendo-se todas juntas. A liberdade asintótica diz que a radiação forte é rara, mas a radiação fraca é comum.

Esta distinção explica porque de um lado temos os jatos, e do outro lado porque os jatos não são partículas únicas. Um evento da CDQ inicia como a materialização do quark e anti-quark, semelhante a como um evento da EDQ inicia, como a materialização do lepton-antilepton.

Elas geralmente nos dão dois jatos, alinhados ao longo das direções originais do quark e anti-quark, porque apenas a radiação forte pode mudar o fluxo global de energia e o momentum significativamente, e a liberdade asintótica nos diz que a radiação forte é rara.

Quando uma radiação forte ocorre, temos um jato extra ! Porém, não vemos os quarks e anti-quarks originais, individualmente, porque eles geralmente estão acompanhados por uma radiação branda, o que é normal.

**“Assim como na EDQ, tais padrões de antena (antenna patterns) proporcionam uma maneira maravilhosamente direta e incisiva de checar a sonorização dos blocos de construção básicos e concêntricos na qual construímos a CDQ”.**

Estudando os padrões de antena dos eventos da CDQ multi-jatos, podemos checar todos os aspectos de nossa hipótese para os eixos subliminares. Assim com na EDQ, tais padrões de antena proporcionam uma maneira maravilhosamente direta e incisiva de checar a sonorização dos blocos de construção básicos e concêntricos na qual construímos a CDQ.

Através da análise desta e de muitas outras aplicações, os físicos têm adquirido uma confiança completa na exatidão fundamental da CDQ. Por agora, os experimentadores usam-na rotineiramente para projetar experimentos pesquisando por novos fenômenos, e eles se referem ao que eles fazem como “calculando as bases”, mais do que “testando a CDQ”!

Muitos desafios permanecem, contudo, para fazer uso completo da teoria. A dificuldade é sempre com a radiação fraca. Tal radiação é emitida muito facilmente, e isso a torna difícil de manter sob controle. você obtém um grande número de grafos de Feynman, cada um com muitos anexos, e tornam-se mais e mais difíceis de enumerar, deixe-os calcular sozinhos. Isto é uma pena, porque quando tentamos reunir um próton

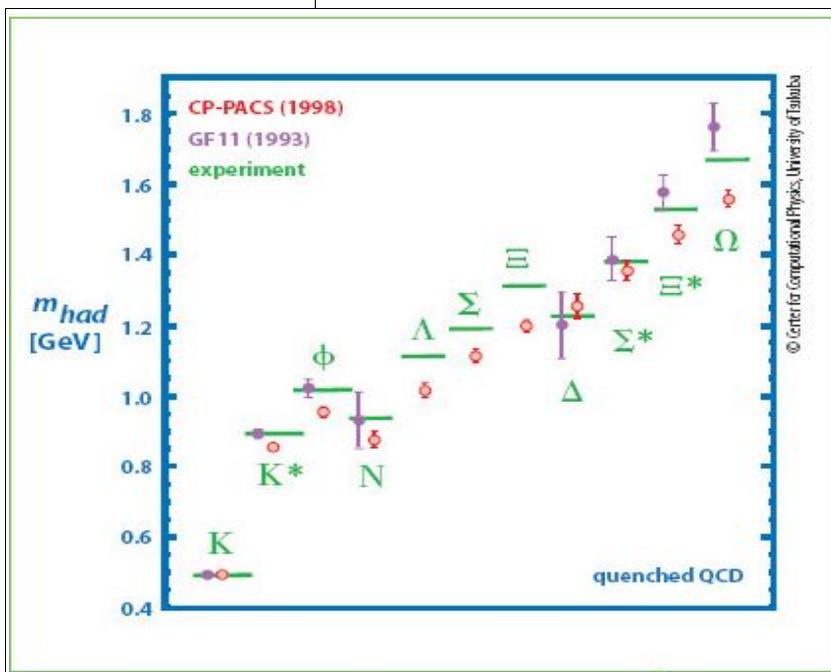
dos quarks e glúons, nenhum deles pode ser mover muito rápido por muito tempo (supoem-se que eles estejam dentro do próton), então todas as suas interações envolvem a radiação fraca.

**Its from Bits (FIGURE 3)**  
**Its from Bits (FIGURE 3)**

This plot, taken from the CP-PACS collaboration, shows a comparison between the predictions of QCD and the masses of particles. The green level lines indicate observed values of particle masses, while the circles within intervals indicate

Para resolver este desafio, é necessária uma estratégia radicalmente diferente. Ao invés de calcular o curso de quarks e glúons através do tempo-espaço, usando os grafos de Feynman, deixamos cada segmento do tempo-espaço seguir como muitos quarks e glúons que ele contém. Então tratamos estes segmentos como uma junção de subsistemas interativos.

Geralmente neste contexto “nós” queremos dizer um conjunto de CPUs trabalhando pesado. Magistralmente orquestrado, e trabalhando em tempo integral à velocidades de teraflops, elas conseguem produzir uma boa quantidade de massas de prótons e outras partículas fortemente interativas, como você pode ver na Figura 3.



As equações da CDQ, que descobrimos e provamos de considerações muito diferentes, sobrevivem a este uso extremamente intenso muito bem.

Há um grande esforço mundial, na fronteira entre a tecnologia dos computadores e a ingenuidade humana, para fazer cálculos como este mais apurados, e para calcular mais coisas.

**Os ingredientes da CDQ, Lite e Full-Bodied**

Com a resposta na mão, vamos examinar o que conseguimos. Para nossos propósitos é interessante comparar as duas versões da

computational results and their statistical uncertainties. The  $K$  meson is the left-most entry, while the proton and neutron are  $N$ . The calculations employ cutting-edge computer technology with massive parallelism, and even then some approximations must be introduced to make the computations feasible. These results are a remarkable embodiment of the vision that elements of reality can be reproduced by purely conceptual constructions—“Its from Bits”—because the underlying theory, based on profoundly symmetrical equations, contains very few adjustable parameters.

CDQ, uma versão idealizada que eu chamo CDQ Lite, e uma versão realista Full-Bodied. A CDQ Lite é inventado de glúons sem massa, quarks  $u$  e  $d$  sem massa, e nada mais. (Agora podemos apreciar totalmente o espírito do nome). Se usamos esta idealização como base para nosso cálculo, obteremos a massa do próton baixa, em torno de 10%.

A CDQ Full-Bodied difere da CDQ Lite de duas maneiras. Primeira, ela contém quatro sabores adicionais de quarks. Estes não aparecem diretamente no próton, porém têm algum efeito como partículas virtuais. Segunda, ela leva em conta massa não zero dos quarks  $u$  e  $d$ .

O valor realista destas massas, no entanto, resulta em pouco, apenas um pequeno percentual da massa do próton. Cada uma destas correções altera a massa prevista do próton em torno de 5%, assim que passamos da CDQ Lite para CDQ Full-Bodied. Assim encontramos que 90% da massa do próton (e neutron), e portanto 90% da massa da matéria comum, emerge de uma teoria idealizada cujos ingredientes são inteiramente sem massa.

### **A Origem da (maioria da) Massa**

Agora que mostrei a você a teoria que descreve quarks e glúons e, portanto, explica a maior parte da massa da matéria, descrevi alguns dos experimentos que confirmam a teoria.

E eu tenho mostrado cálculos de sucesso da massa do hadron, incluindo as massas dos prótons e nêutrons, usando esta teoria.

De certo modo, estes cálculos resolvem a questão. Eles nos dizem a origem da (maioria da) massa. Porém, simplesmente tendo um computador cuspiendo a resposta após cálculos gigantes e totalmente opacos, não satisfaz nossa gana por conhecimento. É particularmente insatisfatório no caso presente, porque a resposta parece ser miraculosa.

Os computadores constroem para nós sólidas partículas usando blocos de construção – quarks e glúons – que são eles próprios sem massa. As equações de CDQ Lite saíam Massa sem Massa, o que soa suspeito como Alguma Coisa por Nada. Como acontece?

A chave, novamente, é a liberdade assintótica. Anteriormente, discuti este fenômeno em termos de radiação forte e leve. A radiação forte é rara, a radiação leve é normal. Existe um outro modo de ver isso, equivalente matematicamente, que seja útil aqui. Das equações clássicas da CDQ, alguém poderia esperar um campo de força entre os quarks que fosse fraco como o quadrado da distância, como no eletromagnetismo comum (Lei de Coulomb). Ressaltado o desdobramento a radiação leve, contudo, significa que quando a mecânica da quantidade é levada em conta uma carga de cor “lisa”, inserida no espaço vazio, se cobrirá com uma nuvem de glúons de cores virtuais.

Estes campos de glúons coloridos carregam eles próprios a carga de cor, e com isso são fontes de radiação leve adicional. O resultado é uma saliência auto-catalítica que leva a um crescimento descontrolado. Uma pequena carga de cor, isolada, estabelece uma grande nuvem pesada de cor.

**“Porém, simplesmente tendo um computador cuspiendo a resposta após cálculos gigantes e totalmente opacos, não satisfaz nossa gana por conhecimento.”**

Toda esta estrutura necessita energia, e teoricamente a energia para um quark isolado é infinita. É por isso que nunca vemos quarks individualmente. Tendo somente uma amostra finita de energia para trabalhar, a Natureza sempre encontra um modo para dar um curto-circuito na pesada nuvem final.

Um caminho é apresentar um antiquark. Se o antiquark pudesse ser colocado no topo do quark, suas cargas de cor cancelariam exatamente, e a pesada nuvem nunca iniciaria. Existe também outro modo sutil de cancelar a carga de cor carregando junto três quarks, um de cada cor.

Na prática estes exatos cancelamentos não podem acontecer, contudo, porque há um efeito de competição. Os quarks obedecem as regras da mecânica quântica. É errado pensar neles simplesmente como minúsculas partículas, se eles são até certo ponto pequenas ondas de mecânica quântica.

Eles estão sujeitos, em particular, ao princípio da incerteza de Heisenberg, o que implica que se você tentar descobrir suas posições muito precisamente, seu momentum será violentamente incerto. Para suportar a possibilidade de um grande momentum, eles devem adquirir uma grande energia. Em outras palavras, se leva o trabalho a

descobrir os quarks. As pequenas ondas querem se propagar.

Assim há uma competição entre os dois efeitos. Para cancelar a carga de cor completamente, gostaríamos de colocar o quark e o antiquark precisamente no mesmo lugar; mas eles resistem a localização, então isto demora a ser feito.

Esta competição pode resultar em um número de soluções comprometidas, juntas, mas onde o quark e o antiquark (ou três quarks) são trazidos não coincidem perfeitamente. Sua distribuição é descrita por funções de ondas da mecânica quântica. Muitos padrões de onda estáveis diferentes são possíveis, e cada um corresponde a um tipo diferente de partícula que você pode observar. Existem padrões para prótons, nêutrons, e para cada entrada no buffet grego inteiro. Cada padrão tem alguma energia característica, porque os campos de cor não cancelaram completamente as partículas e porque as ondas pequenas estão um tanto localizadas. E que, através da  $m=Ec^2$ , é a origem da massa.

Um mecanismo similar, embora mais simples, funciona com átomos. Negativamente elétrons de carga sentem uma força elétrica atrativa dos núcleos carregados positivamente, e desse ponto de vista eles gostariam de ondular exatamente no topo deste. Os elétrons são ondas pequenas, apesar disso, e o que os inibe. O resultado, novamente, é uma série de soluções de compromisso possíveis.

## **“Os padrões de onda que descrevem os prótons, nêutrons e seus parentes se assemelham aos padrões de vibração dos instrumentos musicais”**

Estes são os observados como os níveis de energia do átomo. Quando dou a direção a qual este artigo está baseado, neste ponto eu uso o maravilhoso programa “Átomo em uma Caixa” de Dean Dauger para mostrar os padrões de ondas ondulantes amáveis, quase sensuais, que descrevem os possíveis estados do mais comum dos átomos, o de hidrogênio. Espero que você explore o “Átomo em uma Caixa” por você mesmo. você pode acessar o link <http://www.dauger.com>.

Em sua ausência, substituirei uma metáfora clássica. Os padrões de onda que descrevem os prótons, nêutrons, e seus parentes se assemelham aos padrões de vibrações dos instrumentos musicais. De fato, as equações matemáticas que governam estas superficialmente dos reinados muito diferentes são muito similares.

Analogias musicais retornam a pré-história da ciência. Pitágoras, parcialmente inspirado por sua descoberta que as notas harmônicas são tocadas por cordas cujas extensão estão em taxas numéricas comuns, propôs que “Todas as coisas são Números”. Kepler falou da música das esferas, e suas longas descobertas de suas harmonias escondidas o sustentou através dos anos de cálculos entediantes e falhou em adivinhar antes de ter identificado os padrões verdadeiros do movimento planetário.

Einstein, quando aprendeu o modelo atômico de Bohr, o chamou “a mais alta forma de musicalidade na esfera do pensamento”. Ainda o modelo de Bohr, maravilhoso como ele é, nos parece agora como uma versão muito por água abaixo do verdadeiro átomo onda-mecânico; e o próton onda-mecânico é, de longe, mais intrincado e simétrico!

Espero que algum artista/nerd resolva o desafio, e construa um “Próton em uma Caixa” para brincarmos e admirá-lo.

### **O mundo como Conceito, Algoritmo, e Número**

Eu concluirei com poucas palavras, me concentrando no amplo significado destes desenvolvimentos para nosso retrato do mundo.

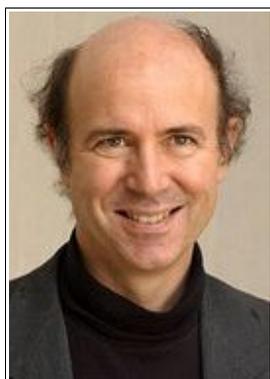
O objetivo maior dos físicos teóricos é descrever o mundo com a maior economia possível de conceitos. Por somente esta razão, é como um resultado importante que eliminamos largamente a massa como uma propriedade independente que somos forçados a introduzir a fim de descrever a matéria mais apuradamente.

Mas tem mais. As equações que descrevem o comportamento de partículas elementares tornam-se fundamentalmente mais simples e mais simétricas quando a massa das partículas é zero. Portanto, a eliminação da massa nos habilita trazer mais simetria dentro da descrição matemática da Natureza.

## **“A eliminação da massa nos possibilita trazer mais simetria dentro da descrição matemática da Natureza”.**

O entendimento sobre a origem da massa que esbocei para você aqui é a mais perfeita realização que temos da 'visão inspiradora que o mundo pode construir dos conceitos, algoritmos, e números' de Pitágoras. A massa, uma propriedade aparentemente irreduzível da matéria, e um sinônimo de resistência a mudança e ondulação, produzem o reflexo ao inter-relacionamento harmônico de simetria, incerteza, e energia. Usando estes conceitos, e os algoritmos que sugerimos, a computação pura resulta em valores numéricos das massas das partículas que observamos.

Ainda, como mencionei anteriormente, nosso entendimento sobre a origem da massa é ainda incompleto. Alcançamos um lindo e profundo entendimento da origem da maior parte da massa da matéria comum, mas não de toda ela. O valor da massa do elétron, em particular, permanece um mistério profundo, mesmo em nossas mais avançadas especulações sobre a teoria da unificação e cordas. E a matéria ordinária, que aprendemos recentemente, supriu apenas uma pequena fração da massa no Universo como um todo. As revelações mais bonitas e profundas certamente aguardam a sua descoberta. Continuamos pesquisando por conceitos e teorias que nos permitirão entender a origem da massa em todas as suas formas, revelando a mais escondida das simetrias.



Frank Wilczek é considerado um dos mais proeminentes físicos teóricos. Ele é conhecido, entre outros trabalhos, pela descoberta da liberdade assintótica, o desenvolvimento da cromodinâmica quântica, a invenção dos axions e a descoberta e exploração de novas formas de estatísticas quânticas (ânions).

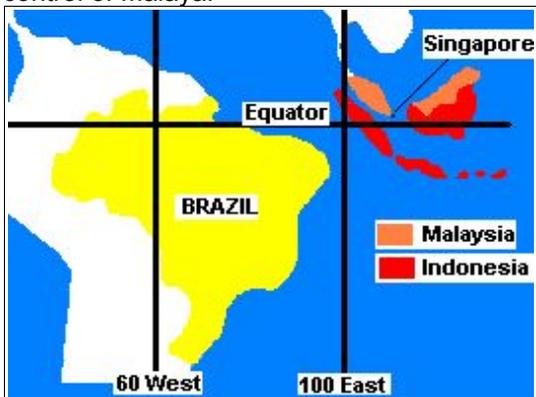
Quando tinha 21 anos e era estudante de graduação na Universidade de Princeton, trabalhando com David Gross, ele definiu as propriedades dos glúons coloridos, que armazenaram o núcleo atômico unido. Recentemente, sua principal obsessão são os superfluídicos exóticos, de um lado, e a energia negra de outro. Ele suspeita que as duas são inter-conectadas. O professor Wilczek recebeu seu grau de B.S. da Universidade de Chicago e seu Ph.D da Universidade de Princeton. Ele lecionou em Princeton de 1974 a 1981. Durante o período de 1981 a 1988, ele foi o Professor Conselheiro de Física de Robert Huttenbak na Universidade da Califórnia em Santa Bárbara, e o primeiro membro permanente do Instituto de Física Teórica da Fundação de Ciência Nacional. Em meados de 2000, ele mudou do Instituto para Estudos Avançados, onde ele foi o Professor J.R. De Oppenheimer, para o Instituto de Tecnologia de Massachusetts, onde ele é o Professor de Física de Herman Feschbach. Foi também associado da Fundação Sloan (1975-1977) e da Fundação MacArthur (1982-1987). Recebeu a medalha Dirac da UNESCO, o Prêmio Sakurai da Sociedade Americana de Física, e o Prêmio Michelson da Universidade do Case Ocidental, e a Medalha Lorentz da Academia Holandesa, por suas contribuições para o desenvolvimento da física teórica, e o Prêmio Lillienfeld por sua obra escrita.

É membro da Academia Nacional de Ciências, da Academia Holandesa de Ciências e da Academia Americana de Artes e Ciências. É ainda Curador da Universidade de Chicago, e um conselheiro oficial para o CERN e o Daedalus. Wilczek contribui regularmente para a Physics Today e para a Nature, explicando tópicos nas fronteiras da física para uma audiência científica mais abrangente.

# A SHORT HISTORY OF MALAYSIA

## PART 1

Malaysia and Brazil has many similarities. In the 1500s the Portuguese was a mighty sea power and she went conquering faraway places. So both Brazil and Malaya were under the control of the Portuguese. Brazil is a much larger country and also nearer by sea to Portugal. So when other nations challenged the Portuguese they decided to focus on South America and so in 1640 the Dutch took over Malaya and Indonesia. By the 1700s the British began to move look towards the East for spices. They went to India and then came to Malaya. The Dutch decided to control Indonesia and so in 1780 the British took control of Malaya.



The Chinese has been roaming the East for centuries, looking for natural resources. In the 1800s when tin was an important commodity the Chinese came to look for tin. By 1840 they have started the tin industry in Malaya.

When rubber became an important commodity the British took some seedlings from Brazil and started planting them in Malaya. Both Brazil and Malaya are at about the same latitude, very near the equator, so it is not surprising that the Brazilian rubber grew very well in Malaysia.

So Malaysia became the largest supplier of tin and rubber to the world for many years to come.

After the Second World War many countries fought for independence. The Indonesian fought the Dutch and got their independence. Malaya was a little more patient and

negotiated with the British until finally in 1957 it was given its independence. The British was left with the northern region of Borneo, Singapore and Brunei. In 1963 the British got the people from the British Borneo (the Southern region belongs to Indonesia), Singapore and Malaya to form a union to be known as Malaysia. And so Malaysia was formed.

Singapore being a more progressive commercial entity did not fit into the union very well and so it was decided that it is better if they go on their own. And so it left Malaysia to be an independent state.

Meanwhile the Dutch were developing the palm oil in Indonesian. In the 1960s the Indonesians were facing social instability and they looked upon the rich Dutch plantation owners as exploiters. They Dutch decided to bring their know-how to Malaysia. They help Malaysia to develop its palm oil plantation.

Palm oil cultivation became so important that many gave up planting rubber to plant palm oil instead. This is because the rubber industry is more labour intensive and profit from the oil palm is better. Also the tin industry was dying as no new tin deposits were found.

So now Malaysia is the world's number one producer of oil palm. It is also the number one producer of electronics components. Malaysia is also self-sufficient in petroleum.



**Dr Ng Swee Ching**  
P.O. Box 151  
80710 Johor Baru  
Malaysia

Tchê Química met Dr Ng through in his site on the Internet, available at [www.geocities.com/chemistry\\_with\\_dr\\_ng](http://www.geocities.com/chemistry_with_dr_ng). Dr Ng is a 58 years old Malayan professor and, for about 25 years, he taught Chemistry in the University of Malaya, but now he is retired doing and interested in doing social work.

He is also sending out an e-daily to those who are interested in the Association of South-East Asia (Asean). South-East Asia is one of the most vibrant economic region in the world today. The people are both Western and China, Japan, South Korea orientated. The e-daily is in English. Those who let to

be included in the mailing list can make a request to Dr Ng Swee Ching, [drscng@singnet.com.sg](mailto:drscng@singnet.com.sg). Please state CANews - request as the subject.

A Tchê Química conheceu o Dr Ng através de seu site na Internet, disponível em [www.geocities.com/chemistry\\_with\\_dr\\_ng](http://www.geocities.com/chemistry_with_dr_ng).

O Dr Ng é Maláio, tem 58 anos e durante 25 anos foi professor de Química na Universidade da Malásia, mas, atualmente, ele está aposentado e realizando trabalho social.

Ele também envia diariamente um jornal eletrônico para os interessados na Associação do Sudeste da Ásia (Asean). O sudeste da Ásia é uma das regiões econômicas mais vibrantes do mundo hoje em dia. Pessoas interessadas em ser incluídas na lista de endereços para receber o Jornal eletrônico devem escrever para o Dr Ng Swee Ching, [drscng@singnet.com.sg](mailto:drscng@singnet.com.sg). No campo assunto da mensagem devem adicionar o seguinte Título Please state CANews – request. O jornal CANews é escrito em **Inglês**.

# SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E ESTUDOS TÉRMICOS, VIBRACIONAIS E CONDUTIMÉTRICOS DOS CLORETOS DE PRASEODÍMIO E NEODÍMIO COM A 1,10 - FENANTROLINA

Débora de Carvalho Lira, Francisco José Santos Lima e Ademir Oliveira da Silva.  
Departamento de Química – CCET/UFRN - Natal – RN – Brasil.

## Abstract

In the last years lanthanides compounds with organic ligands have been studied extensively due to its wide applicability in several areas of science and technology. Some of these applications can be resumed: oil cracking and antipollution catalysts, fluorescent substances to produce primary colors in video monitors, lasers to micro solders and surgery, refractory ceramic, specials glasses, optical fiber. In this article, lanthanides chlorides with 1,10-phenantroline complexes were synthesized and characterized and the ions behavior correlated to environment chemistry was studied. The physical-chemical analysis permits the stoichiometry definition, the geometrical proposal and the evaluation of the final complexes thermic stability.

Keywords – Lanthanide chlorides, 1,10-phenantroline, coordination compounds

## Resumo

Nos últimos anos compostos de lantanídeos com ligantes orgânicos vem sendo objeto de pesquisa, apresentando aplicação prática em diversas áreas da ciência e tecnologia. Algumas dessas aplicações podem ser resumidas tais como: usos em catalisadores no craqueamento do petróleo e antipoluentes, substâncias fluorescentes para produção de cores primárias em monitores de vídeos, lasers para microsoldagens e cirúrgicos, cerâmicas refratárias, vidros especiais, fibras ópticas entre outras. Neste trabalho foram sintetizados e caracterizados complexos entre cloretos de lantanídeos e o ligante 1,10-fenantrolina, e investigado o comportamento dos íons em relação a este ambiente químico. As análises físico-químicas permitiram definir estequiometrias, propor geometrias dos íons complexos e avaliar a estabilidade térmica dos complexos obtidos.

**Palavras – chaves:** Cloretos de lantanídeos, 1,10 fenantrolina, compostos de coordenação.

## Introdução

Desde a década de 1960 [ABRÃO 1994, HUHEY 1983, HART 1987, ZINNER 1982], compostos de coordenação com íons lantanídeos têm sido investigados pelos grupos de pesquisa em todo o mundo. O interesse nesta classe de compostos tem atendido a diversos campos de atividades humanas, iniciando com a investigação acadêmica, passando pela descoberta e aplicação de novas técnicas de perscruta, e culminando com a confecção de novos materiais, objetivando sempre, aplicações em novas tecnologias. Os elementos lantanídeos têm se prestado como uma alternativa viável e estratégica na substituição de outros metais em determinados compostos, objetivando a melhoria da qualidade dos materiais, aumentando assim suas eficiências em certas propriedades físico-químicas peculiares. São conhecidas suas aplicações mais difundidas tais como

fabricação de vidros especiais absorvedores, emissores e conversores de radiação uv-visível, confecção de componentes eletro-eletrônicos aplicados em displays LCD (liquid crystal display) e RCT (ray catode tube), síntese de substâncias geradoras de cores primárias em monitores de vídeo, manufatura de materiais magnéticos e supercondutores, entre outros. Toda esta diversidade de áreas de aplicação que envolve alta tecnologia se deve as suas características físicas e químicas peculiares, não observadas e em certos aspectos indisponíveis, em outros elementos.

Neste trabalho desenvolvemos a síntese e apresentamos a caracterização destes compostos através de técnicas bem conhecidas a fim de disponibilizar o material criteriosamente, para investigações espectroquímicas posteriores.

## Parte experimental

A metodologia utilizada na síntese dos complexos teve como precursores os cloretos de praseodímio e neodímio. Os cloretos inicialmente foram sintetizados a partir de uma suspensão aquosa dos seus respectivos óxidos, a uma temperatura de 60 °C, com adição lenta de HCl concentrado, sob agitação constante. Em seguida foram colocados para evaporar em banho-maria e após cristalização, os cloretos foram transferidos para frascos e mantidos em dessecadores, para evitar que absorvessem umidade do ar. A síntese dos complexos foi realizada, adicionando-se a solução do ligante 1,10 fenantrolina em acetona, na solução dos cloretos, em meio etanólico numa proporção de 1:4. A mistura resultante apresentou-se turva. Após a evaporação dos solventes, evidenciou-se a formação de um pó fino, de coloração rósea, tanto para os cloretos de praseodímio como de neodímio. Em seguida foram lavados com acetona, secados e mantidos sob vácuo.

As análises de lantanídeos foram realizadas a partir da técnica de complexometria com EDTA padrão e ortoxilenol como

indicador, em nossos laboratórios de química inorgânica da UFRN (Universidade Federal do Rio Grande do Norte). Os percentuais de carbono, nitrogênio e hidrogênio foram analisados em um equipamento Carlo Erba no laboratório da UFPE (Universidade Federal de Pernambuco). Os estudos termogravimétricos dos compostos foram realizados utilizando-se uma termobalança PERKIN ELMER modelo TGA7 em atmosfera dinâmica de ar, razão de aquecimento 10 °C min<sup>-1</sup> e massa em torno de 2,5 mg no laboratório de análise térmica da UFRN. Espectros vibracionais na região do infravermelho, foram registrados em um equipamento BOMEM modelo 100 da UFRN empregando pastilhas de KBr, na faixa espectral de 4000 a 400 cm<sup>-1</sup>. Medidas de condutância das soluções aquosas e etanólicas foram obtidas a partir de um condutivímetro METHRON com banho termostatizado a 25,0 °C e constante de cela de 0,0289 cm<sup>-1</sup>. As moléculas-íon foram modeladas pelo uso do programa WebLab ViewerPro a partir das informações experimentais reveladas pelas técnicas de investigação.

## Resultados e discussão

De acordo com procedimentos usuais de CHN, titulação complexométrica com EDTA e dados termogravimétricos, os compostos apresentaram a estequiometria [PrCl<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>(C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]Cl e [NdCl<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>(C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]. A Tabela 01 apresenta os dados experimentais obtidos.

Tabela 01 - Análise Elementar

Estequiometria	% Metal		% Carbono		% Hidrogênio		% Nitrogênio	
	Teór	Exp	Teór	Exp	Teór	Exp	Teór	Exp
[PrCl <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> ]Cl	6,12	6,36	48,26	48,41	4,05	4,72	9,38	8,94
[NdCl <sub>3</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>4</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> ]	6,02	6,00	50,07	50,25	3,73	4,50	9,73	9,60

As decomposições térmicas dos compostos ocorreram na faixa de temperatura de aproximadamente 40-600 °C, através de reações sucessivas (decomposição dos compostos e formação de produtos), com obtenção dos respectivos óxidos como produto final. A 1ª etapa de decomposição está associada à saída da água e mais uma fração do ligante. As três etapas seguintes são atribuídas à decomposição do ligante, para em seguida ocorrer também à decomposição do ânion, onde se observa uma ligeira modificação na inclinação da curva, que representa a taxa de perda de massa com relação ao eixo de temperaturas. A última etapa deve-se a formação do óxido de lantanídeo como produto final. A Tabela 02 e a Figura 01 retratam este resultado.

Tabela 02 – Dados Termogravimétricos

Complexos	Intervalo de Temperatura (°C)	Perda de Massa (g mol <sup>-1</sup> )		Atribuições
		Teór	Exp	
[PrCl <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> ]Cl	31,35 – 131,89	138,68	138,96	H <sub>2</sub> O, ligante
	131,89 – 278,89	207,24	208,84	ligante
	278,62 – 392,75	183,81	184,47	ligante
	392,75 – 544,92	192,86	193,13	ligante, ânion
[NdCl <sub>3</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>4</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> ]	31,35 – 152,28	136,91	136,90	H <sub>2</sub> O, ligante
	152,26 – 307,18	194,62	195,25	ligante
	307,26 – 399,54	173,00	172,99	ligante
	399,52 – 542,22	191,06	192,03	ligante, ânion

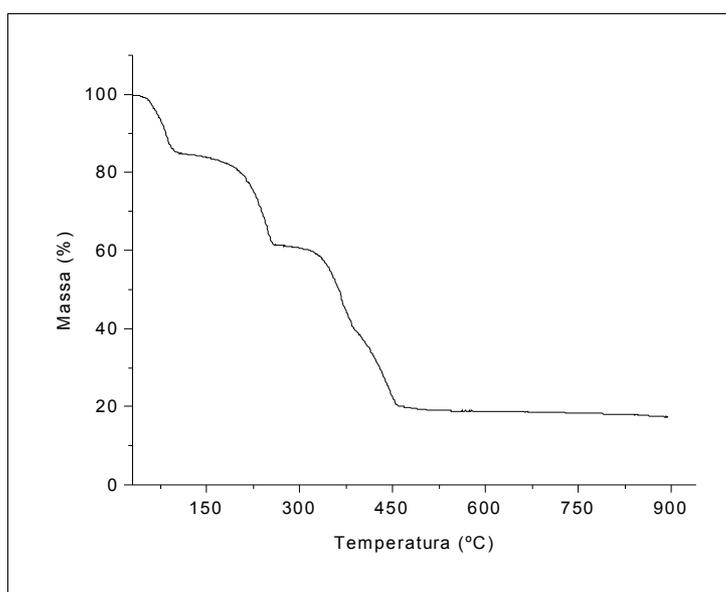


Figura 01 - Curva termogravimétrica do composto [PrCl<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>(C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]Cl em atmosfera dinâmica de ar, razão de aquecimento 10 °C min<sup>-1</sup>.

Comparando-se os espectros infravermelhos do ligante livre e do ligante coordenado ao metal, observa-se que houve deslocamento das bandas CN que ocorrem no ligante livre em 1343 – 1294 cm<sup>-1</sup> [NAKAMOTO 1986], para regiões tanto de maior como de menor frequências, evidenciando a coordenação metal-ligante via átomo de nitrogênio do grupamento amina. Já as bandas nas regiões de 3507 cm<sup>-1</sup> e 1595 cm<sup>-1</sup> [NAKAMOTO 1986] referente às vibrações de deformação axial assimétrica do grupo OH e deformação angular simétrica do grupo H-OH respectivamente, presentes nos espectros dos compostos em estudo, evidenciaram que os mesmos foram obtidos na forma hidratada. A Figura 02 ilustra o espectro na região do infravermelho para o compostos de praseodímio.

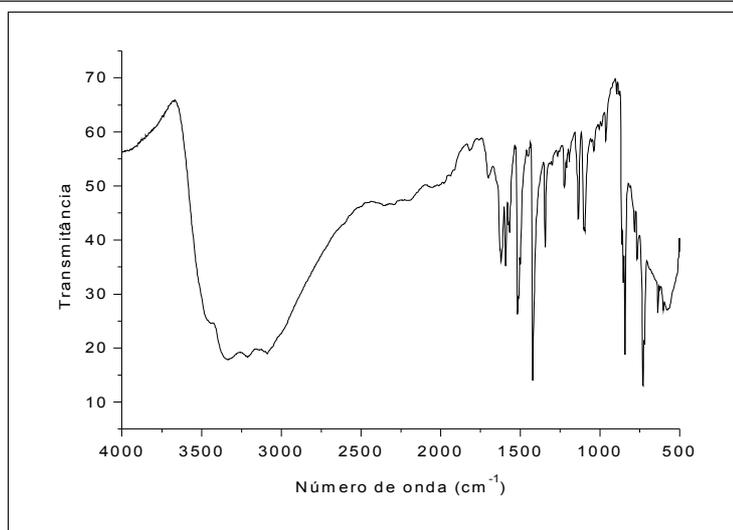


Figura 02 - Espectro de absorção na região do infravermelho para o composto  $[\text{PrCl}_2(\text{H}_2\text{O})_6(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_3]\text{Cl}$ .

Os compostos foram caracterizados também por condutância eletrolítica molar, técnica que tem sido muito útil para auxiliar na determinação das estruturas, sendo este tipo de informação complementada pelos espectros de absorção na região do infravermelho, possibilitando sugerir a coordenação ou não do ânion ao íon metálico central, avaliando o comportamento eletrolítico da solução na presença de solventes especiais. Comparando-se os valores das medidas de condutância molar em etanol para os complexos em estudo, com aqueles estabelecidos por [GEARY 1971] para soluções etanólicas, foi sugerido um comportamento de um composto não-eletrólito para o  $\text{NdCl}_3(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  e eletrólito 1:1 para o  $\text{PrCl}_3(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Já os valores de condutância molar para os sais em água mostraram que eles se comportaram como eletrólito 1:3, e em etanol 1:1. A partir dessas informações foram feitas as modelagens para as moléculas-íons  $[\text{Nd}(\text{H}_2\text{O})_7]^{3+}$ ,  $[\text{NdCl}_2(\text{H}_2\text{O})_7]^+$ ,  $[\text{Pr}(\text{H}_2\text{O})_7]^{3+}$  e  $[\text{PrCl}_2(\text{H}_2\text{O})_7]^+$ , obtidas através do programa WebLab ViewerPro [ATKINS 1999], (Figuras 03 e 04), onde observamos que em água os três íons cloretos se encontram fora da primeira esfera de coordenação permitindo aos metais uma diminuição em seu número de coordenação, fato ocorrido devido a alta constante dielétrica da água. Em etanol, dois íons cloretos permanecem na primeira esfera de coordenação, e o terceiro se encontra dissociado, tal como mostrado nas figuras a seguir.

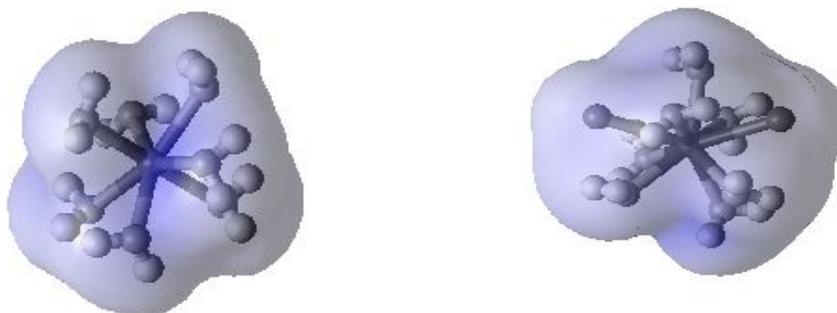


Figura 03 – Modelagem do íon  $[\text{Pr}(\text{H}_2\text{O})_7]^{3+}$  em solução aquosa e do íon  $[\text{PrCl}_2(\text{H}_2\text{O})_7]^+$  em solução etanólica. A curva de superfície de potencial eletrostático está mostrado no desenho.

Legenda: átomos de hidrogênio (branco); oxigênio (cinza claro); cloro (cinza escuro); lantanídeo (preto).

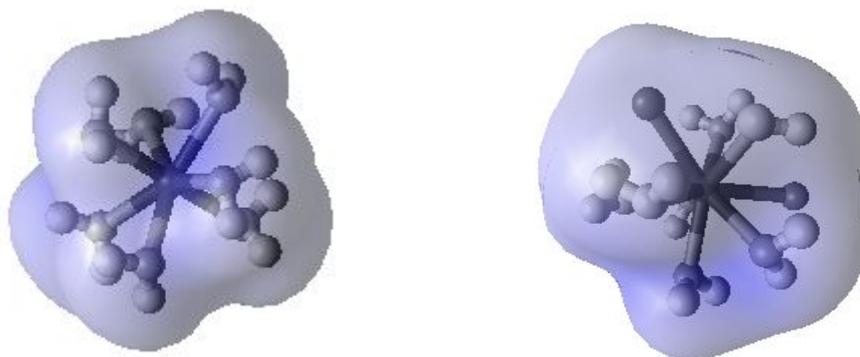


Figura 04 – Modelagem do íon  $[\text{Nd}(\text{H}_2\text{O})_7]^{3+}$  em solução aquosa e do íon  $[\text{NdCl}_2(\text{H}_2\text{O})_7]^+$  em solução etanólica. A curva de superfície de potencial eletrostático está mostrado no desenho.

Legenda: átomos de hidrogênio (branco); oxigênio (cinza claro); cloro (cinza escuro); lantanídeo (preto).

No complexo de neodímio, diferentemente do comportamento eletrolítico apresentado pelo sal em solução etanólica, todos os cloretos estão na primeira esfera de coordenação. Acreditamos que o impedimento estérico causado pela orto-fenantrolina, quando da formação do complexo, favoreceu a migração de um íon cloreto que estava na esfera iônica no ambiente químico do sal, para a esfera de coordenação no complexo. No composto de praseodímio, tal comportamento não é observado pelos dados de condutância. Provavelmente isto se deve ao grau de hidratação mais elevado no complexo.

#### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelo suporte financeiro.

#### Referência bibliográfica

- 01 – ABRÃO, A. - **Química e tecnologia das terras raras**, CETEM/CNPq, RJ, (1994).
- 02 - ATKINS, P. – **Chemical principles: the quest for insight** – W. H. Freeman and Company, New York, (1999).
- 03 - GEARY, W . J. – **The use of conductivity measurements in organic solvents for the characterization of coordination compounds** – Coord. Chem. Rev., 7, (1971), 81-122.
- 04 - HART, F. A. - **Scandium, yttrium and the lanthanides** - Comprehensive Coordination Chemistry - Ed. Sir Geoffrey Wilkinson, F. R. S. - 1ª Ed., Vol. 3 - Main Group Early Transition Elements, Pergamon Press, 1ª Ed., Oxford, England, Ch. 39, (1987), 1059-1127.
- 05 – HUHEY, J. E. – **Inorganic chemistry, principles of structure and reactivity**, Harper International Ed, New York, (1983).
- 06 – NAKAMOTO, K. – **Infrared and raman spectra of inorganic and coordination compounds** – A Wiley Interscience Publication, printed in USA, (1986).
- 07 – ZINNER, L. B. – **Produção e Aplicações de Terras Raras. Um campo pouco explorado no Brasil** – VI Simpósio Annual da ACIESP, Anais da ACIESP, Vol.1, (1982), 110-46.

# SABÕES E DETERGENTES

\* Eduardo Goldani

## INTRODUÇÃO

A maioria das pessoas concorda com Arthur Schopenhauer, o grande filósofo alemão que disse: "A saúde não é tudo; porém, sem saúde, tudo é nada". Quando nos perguntamos sobre nossos desejos e esperanças para o futuro, aparece sempre, em primeiro lugar, a saúde. Mas o que é, na verdade, saúde? Em termos ideais, é um estado total de bem estar físico, espiritual e social. Para o indivíduo, saúde significa não estar doente, mas sim capacitado, em forma e com boa disposição.

Não existe garantia para a saúde eterna. Ninguém escapa de doenças, ferimentos, infecções e dores, pois estes riscos fazem parte da vida. Antigamente pensava-se que as bactérias haviam sido dominadas. Mas a falha existente no esclarecimento da população e, principalmente, nas condições de higiene, fazem com que as doenças infecciosas sejam as maiores ameaças à vida e à saúde.

Atualmente, as vacinas constituem uma boa proteção contra várias epidemias e a maioria das doenças infecciosas podem ser curadas com antibióticos. Entretanto, água e sabão são os melhores remédios e, na maioria das vezes, os mais baratos. Hoje em dia as pessoas estão dando mais valor à saúde tendo em vista que as bactérias estão vencendo, mais do que antes, as nossas defesas. Muitos antibióticos não fazem mais efeito e agora, mais do que nunca, prevenir é melhor (e mais barato) do que remediar. Por incrível que pareça, a solução para muitas doenças é a mais prática e trivial maneira de se evitar a proliferação de microorganismos invasores: lavar freqüentemente as mãos e ter mais cuidado com a higiene. Daí a extrema importância do sabão!

## HISTÓRICO

O sabão é conhecido há mais de 2.500 anos. As referências mais antigas em relação aos sabões remontam ao início da Era Cristã. O sábio romano Plínio, o Velho (Gaius Plinius Secundus, 23 ou 24-79 d.C.), autor da célebre *História Natural*, menciona a preparação de sabão a partir do cozimento do sebo de carneiro com cinzas de madeira. De acordo com sua descrição, o procedimento envolve o tratamento repetido da pasta resultante com sal, até o produto final. Segundo Plínio, os fenícios conheciam essa técnica desde 600 a.C. O médico grego Galeno (130-200 d.C.), que fez carreira, fama e fortuna em Roma, também descreve uma técnica segundo a qual o sabão podia ser preparado com gorduras e cinzas, apontando a sua utilidade como medicamento para a remoção da sujeira corporal e de tecidos mortos da pele. Os antigos romanos apreciavam muito os diferentes e perfumados tipos de sabões em suas termas, mas com a queda do império ninguém mais ouviu falar de tal produto. O sabão só veio reaparecer no século IX na cidade de Sávona, Itália (eis aí a origem de seu nome), mas apenas pelos nobres. A difusão em larga escala do sabão só veio a ocorrer cerca de dez séculos depois, onde o químico alemão Justus von Liebig declarou que o grau de civilização era diretamente proporcional à quantidade de sabão consumida.

No século XIII a indústria do sabão foi introduzida na França, procedente da Itália e da Alemanha. No século XIV, passou a se estabelecer na Inglaterra. Na América do Norte, o sabão era fabricado artesanalmente até o século XIX. A partir daí surgem as primeiras fábricas. No Brasil a indústria de sabões data da segunda metade do século XIX. Dois grandes avanços químicos marcaram a revolução na produção de sabões. O químico francês Nicolas Leblanc (1742-1806), deu o primeiro grande passo rumo à fabricação comercial de sabão em larga escala. Seu processo (patenteado em 1791) utilizava uma salmoura (solução de cloreto de sódio) para produzir hidróxido de sódio por eletrólise, o que veio a proporcionar um material com alto grau de pureza agilizando, deste modo, a preparação do sabão de qualidade superior, e ainda a barrilha (carbonato de sódio), o elemento ativo encontrado nas cinzas que se junta à gordura para fazer o sabão. Com este processo eram geradas quantidades de soda de boa qualidade a um baixo custo.

Em meados de 1800, o químico belga Ernest Solvay inventou o processo da amônia, onde também o sal comum era utilizado para fazer a soda. O processo Solvay reduziu ainda mais o custo da soda e aumentou tanto a qualidade quanto a quantidade de soda disponível para a fabricação de sabão. Anos mais tarde, Michel Eugéne Chevreul (1786-1889), entre 1813 e 1823, esclareceu a composição química das gorduras naturais. Assim, os fabricantes do século XIX puderam ter uma idéia do processo químico envolvido, bem como dispor da matéria-prima necessária.

## SABÃO: PREPARAÇÃO E PROPRIEDADES

O sabão, por definição, é qualquer sal de ácido graxo, ou seja, é o produto da *reação de saponificação* de uma matéria graxa com um álcali, geralmente NaOH.

- Ácidos Graxos de 8-22 carbonos são os constituintes mais comuns da produção de sabões comercial.
- Muitos sabões têm algum grau de solubilidade com água.
- Tanto os ácidos graxos saturados, como os insaturados são usados na produção de sabões.

Sabões saturados:  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{COOM}$ ,  $n = 6-20$ ;  $M = \text{Na}, \text{K}$ .

Sabões insaturados:  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2(\text{CH}_2)_6\text{COOM}$

Oleico  $n = 6$

$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n(\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH})_2\text{CH}_2(\text{CH}_2)_6\text{COOM}$

Linoléico  $n = 3$

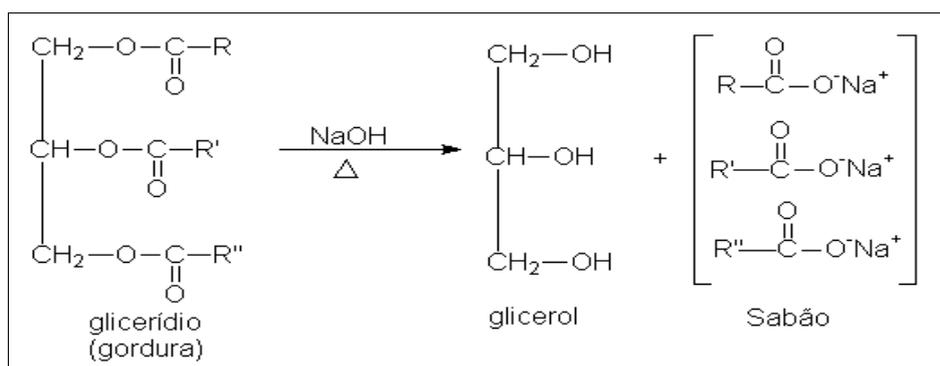
$\text{CH}_3(\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH})_3\text{CH}_2(\text{CH}_2)_6\text{COOM}$

Linolênico

Os sabões de Sódio são os mais comuns e aceitos no mercado devido à:

1. O NaOH é uma base forte, portanto é muito reativa, favorecendo o processo de saponificação;
2. Os sabões de sódio apresentam solubilidade e consistência adequadas para comercialização;
3. O NaOH é encontrado em abundância a bons preços no mercado;

A *saponificação* consiste na formação do sabão propriamente dito, através da reação de ácidos graxos e soda cáustica, tendo como produtos o sabão e o glicerol.



O sabão tem grande aplicação como produto de limpeza porque é um composto tensoativo. Tensoativos são todas as substâncias capazes de modificar a tensão superficial de um sólido ou de um líquido ou modificar a tensão interfacial líquido-sólido, líquido-líquido e líquido-gás de um sistema. Os tensoativos possuem uma estrutura molecular complexa. Uma molécula de sabão tem uma extremidade polar,  $-\text{COO}^-\text{Na}^+$ , e uma parte não polar, R-, constituída por uma longa cadeia alquílica, normalmente com 12 a 18 carbonos. A extremidade polar é solúvel em água e chama-se *hidrófila ou hidrofílica ou lipofóbica* - que tem afinidade por água. A parte apolar é insolúvel em água e denomina-se *hidrofóbica ou lipofílica* - que tem aversão por água e afinidade por óleos e gorduras, mas é evidentemente solúvel em solventes

apolares. Moléculas deste tipo denominam-se *anfipáticas* - que têm extremidades polares e apolares e, além disso, são suficientemente grandes para que cada extremidade apresente um comportamento próprio relativo à solubilidade em diversos solventes. A interação entre os dois grupos (o grupo apolar e o grupo polar) produz mecanismos adequados para remoção de sujidades em lavagens com água. Os tensoativos podem ser classificados por:

- Aniônico: o radical hidrófilo é um ânion;
- Catiônico: o radical hidrófilo é um cátion; não são eficientes na remoção de sujeiras, mas possuem elevado poder germicida;
- Não-iônico: não possui cátion e nem ânion; é compatível com tensoativos aniônicos e catiônicos.
- Anfótero: comporta-se como aniônico ou catiônico, em função do pH do meio.

## COMO O SABÃO REMOVE A GORDURA, SENDO FEITO DELA?

A capacidade de limpeza dos sabões e detergentes depende da sua capacidade de formar emulsões com materiais solúveis nas gorduras, ou seja, eles agem de forma a diminuir a tensão superficial da água. Na emulsão, as moléculas de sabão ou detergente envolvem a sujeira de modo a colocá-la em um “envelope” solúvel em água, a *micela*. Partículas sólidas de sujeira dispersam na emulsão.

O problema na lavagem pelo sabão está na gordura e óleo que constitui ou que existe na sujeira. Apenas a água não é capaz de dissolver as gorduras, por serem *hidrofóbicas*; as gotas de óleo, por exemplo, em contato com a água, tendem a coalescer (aglutinar-se umas às outras), formando uma camada aquosa e outra oleosa. A presença do sabão, entretanto, altera este sistema. As partes apolares das moléculas do sabão dissolvem-se nas gotículas do óleo, ficando as extremidades dos carboxilatos imersas na fase aquosa circundante. A repulsão entre as cargas de mesmo sinal impede as gotículas de óleo de coalescerem. Forma-se então uma emulsão estável de óleo em água, que é facilmente removida da superfície que se pretende limpar através de agitação, ação mecânica, etc.

Os sabões são ineficientes em água dura. A água que contém outros íons metálicos, além dos metais alcalinos, se denomina, de um modo geral, *água dura*. Isto porque, pela adição de sabão, produz um precipitado insolúvel (palmitato ou estearato de cálcio, magnésio ou ferro) em vez de formar espuma como com a água pura. A água que contém bicarbonato de cálcio ou magnésio se denomina água de dureza temporária, o que a diferencia da água de dureza permanente, que contém cloreto de cálcio ou magnésio dissolvidos. Tanto a água de dureza permanente quanto a de dureza temporária podem sofrer processos de abrandamento que venham a eliminar os sais que conferem a dureza na água. Uma das operações de abrandamento utilizadas para eliminar os sais de  $\text{Ca}^{2+}$  e  $\text{Mg}^{2+}$  consiste em fazer passar a água dura por um leito de zeólitos, que são silicatos duplos hidratados, consistindo de um álcali, ou de um óxido alcalino ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ , sílica e  $\text{H}_2\text{O}$ ), fazendo com que estes íons sejam absorvidos pelo zeólito que, em troca, cede o íon  $\text{Na}^+$  à água, conseguindo, desta forma, a eliminação dos sais e, conseqüentemente, da “dureza” da água.

## OS DETERGENTES

Os detergentes são o maior sucesso comercial da química do século XX. Representam 85 % do consumo mundial de materiais de limpeza, avaliado, juntamente com os sabões, em termos de produção global. Como os sabões, eles são anfifílicos, ou seja, limpam através do mesmo processo de solubilização de gorduras, mas seu grupo iônico é qualquer um diferente do carboxilato, podendo ter cargas positivas ou negativas. A primeira versão dos detergentes surgiu na Europa, durante a Primeira Guerra Mundial (1914-1918). Eles eram obtidos da sulfatação (reação com o ácido sulfúrico) dos ácidos graxos (isto é, de cadeia longa, maior do que oito carbonos) derivados de gorduras animais (sebo) e vegetais (óleo de coco), seguida de neutralização por hidróxido de sódio. Formam-se assim os alquilsulfatos de sódio, dos quais o mais usado é o dodecilsulfato de sódio, também chamado laurilsulfato de sódio.

Os detergentes foram usados pela primeira vez em lavagens da indústria têxtil. Como eles se mostraram bastante eficientes, passaram a ser usados com excelente desempenho na limpeza doméstica, na fabricação de xampus e de pasta de dentes, principalmente na América do Norte. Na década de 30, foram desenvolvidos os alquilbenzenossulfonatos de sódio, dos quais o dodecil ou laurilbenzenossulfonato é o mais comum. Ainda hoje, é o componente ativo das principais marcas de sabão em pó e detergentes líquidos do comércio. O detergente líquido – comum nas prateleiras dos supermercados e de grande aceitação pelas donas de casa – nada mais é do que uma solução desse anfifílico, cuja viscosidade foi aumentada pela adição de um sal, que pode ser o sulfato de sódio, ou, mais freqüentemente, cloreto de sódio. À essa solução é acrescentado aroma, mais para estimular o consumo do que por razões técnicas. Algumas formulações também contêm detergentes não-iônicos, que se destacam pela boa capacidade de solubilizar graxas.

Encontram-se disponíveis nos mercados, adicionalmente, os detergentes líquidos catiônicos, nos quais o anfifílico é derivado de sal de alquilamônio. Eles se distinguem dos demais por exalar um forte cheiro amoníaco. Isso se deve à presença de amônia que, conferindo alcalinidade ao meio, ajuda na decomposição por hidrólise das gorduras. A associação da reação química com o efeito da solubilização do anfifílico catiônico resulta em um enorme poder de limpeza.

### **A FABRICAÇÃO DE UM DETERGENTE**

O dodecilbenzenossulfonato de sódio é formado por matérias-primas provenientes da indústria petroquímica. Essa indústria transforma as estruturas dos materiais naturalmente encontrados no petróleo em grande número de derivados. As usinas fornecem o dodecilbenzeno (ou laurilbenzeno), no qual a cadeia de doze carbonos foi obtida pela tetramerização (formação do polímero de quatro unidades) do propeno (propileno). O laurilbenzeno é a seguir sulfonado por reação com excesso de ácido sulfúrico. Finda mais essa etapa, a mistura é escoada de um chuveiro, instalado no alto de uma torre, em cuja base é injetado ar quente. As gotas da solução secam ao cair em contracorrente com o ar aquecido, formando um “grãozinho” (contendo dodecilbenzeno\_sulfonato de sódio e sulfato de sódio) que lembra a forma de uma pipoca estourada. Essa aparência pode ser facilmente identificada observando-se um punhado de sabão em pó.

O sulfato de sódio, que se cristaliza junto com o detergente, exerce um papel que é chamado na indústria por *carga*, isto é, atua como material que aumenta o volume do produto final. Para terminar, é acrescentado um corante (menos de 1% em massa, apenas para dar aparência atraente), um perfume (as donas de casa gostam) e 1% de carboximetilcelulose, uma substância que adere às fibras, especialmente de algodão, para impedir a redeposição de sujeira. Além disso, superfícies brancas aparentam ser mais brancas quando tem um tom levemente azulado. Por isso, acrescenta-se cerca de 1% de branqueador óptico, um corante capaz de apresentar fluorescência, especialmente na cor azul. A fluorescência é a capacidade que certas substâncias têm de absorver luz invisível – como a radiação ultravioleta (UV) – e emitir luz visível, em diversos comprimentos de onda. O branqueador óptico adere nas fibras do tecido e, com a fluorescência azulada, aumentam o brilho e a alvura. Desse modo, se consegue o “branco mais branco!”.

### **DETERGENTES BIODEGRADÁVEIS**

Quando se utilizam sabões nos processos industriais ou domésticos de lavagem, eles vão para o sistema de esgotos e acabam nos lagos e rios. Porém, após certo tempo, os resíduos são degradados (decompostos) por microorganismos que existem na água. Diz-se, então, que os sabões são biodegradáveis e que não causam grandes alterações ao meio ambiente. Os detergentes não-biodegradáveis, pelo contrário, acumulam-se nos rios, formando uma camada de espuma que impede a entrada de oxigênio na água e pode remover a camada

oleosa que reveste as penas de algumas aves, impedindo que elas flutuem. Na água existem microorganismos que produzem enzimas capazes de quebrar as moléculas de cadeias lineares. Essas enzimas, porém, não reconhecem as moléculas de cadeias ramificadas, fazendo com que esses detergentes permaneçam na água sem sofrer degradação (não-biodegradável).

Desta forma, torna-se imprescindível o cuidado na relação entre a produção de detergentes e a poluição, sendo que nos EUA é ilegal a comercialização de detergentes não-biodegradáveis. No começo da década de 60, enormes quantidades de detergentes que continham cadeias ramificadas estavam sendo usadas. Estes detergentes não eram degradados pelas bactérias e apareciam na descarga dos esgotos nos rios, fazendo com que mesmo os grandes rios, como o Mississipi, se tornassem imensas bacias de espumas.

Vários detergentes muito eficientes não espumam em água. Embora os trabalhos de laboratório tenham mostrado que o grau de formação de espuma tem muito pouco a ver com a eficiência do detergente, as donas-de-casa geralmente associam a espuma como um fator de eficiência. Por isto, os fabricantes freqüentemente adicionam agentes espumantes aos seus produtos.

No caso específico dos detergentes, temos que classificar a biodegradação em dois tipos:

- Primária: entende-se pela alteração da estrutura de um tensoativo, com conseqüente perda de suas propriedades pela ação de enzimas.
- Secundária ou Avançada: consiste na quase total mineralização das substâncias orgânicas, através da oxidação biológica total, por organismos aeróbicos (enzimas), em componentes primários ( $\text{CO}_2$ , água, sais e  $\text{NH}_3$ ).

Estudos científicos demonstraram que a ação de biodegradação por enzimas se inicia na extremidade da cadeia alquílica. A existência de átomos de carbono terciários ao longo da cadeia (ramificações) requer para sua biodegradação um processo mais lento de adaptação enzimática.

## EUTROFIZAÇÃO

É o fenômeno da superfertilização de leitos aquáticos estacionários (lagos, represas, arroios), provocando crescimento desordenado da vida vegetal, em detrimento da vida animal.

Os tensoativos não estão relacionados diretamente com este fenômeno. Ele é afetado, contudo, pelos fosfatos que acompanham os tensoativos na preparação de detergentes. Estes fosfatos presentes nos detergentes têm duas funções: abrandador da água e dispersante de sujeira. Em países de água dura, estão substituindo o fosfato por EDTA, que também pode ser usado como abrandador. Isto permite reduzir em cerca de 50% o uso de fosfatos em detergentes, acarretando em uma menor contribuição para este fenômeno.

No Brasil, o problema no tocante aos detergentes ainda inexistente, pois o consumo de fosfato nos detergentes é baixo, devido ao baixo teor de água dura no território brasileiro e pelo baixo número de leitos parados.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao contrário do que se pensa, o sabão por si só não limpa coisa alguma. Essa aparente contradição pode ser entendida quando se sabe que os detergentes - entre os quais a forma mais simples e conhecida é o sabão - são agentes umectantes que diminuem a tensão superficial observada nos solventes, permitindo maior contato dos corpos com os líquidos, que realmente limpam.

Embora a maior parte dos detergentes seja destinada à limpeza com água, existem alguns produzidos para limpeza com outros solventes, como no caso dos óleos para motores, onde a água não pode ser usada. Nesse caso, o sódio e o potássio são substituídos pelo chumbo ou o cálcio. Os sabões e os detergentes possuem as mais diversas aplicações, que vão desde a limpeza doméstica até industrial. Sua tecnologia, pouco desenvolvida até 1934, evoluiu bastante a partir dessa época, tornando sua produção altamente industrializada e, com isso, acirrou ainda mais a concorrência das indústrias na busca de novas tecnologias e fórmulas que

venham a conquistar o consumidor.

Em 2003, a produção de sabões e detergentes correspondeu a 5% em relação a tudo que se produziu pelo setor industrial químico brasileiro. Este percentual pode parecer baixo, mas isso representa uma quantia de 2,1 bilhões de dólares de faturamento somente deste setor da indústria química. Com o aumento da concorrência e a abertura de novas indústrias no país focadas nesta fatia do mercado, esse percentual deverá crescer gradativamente e atingir cifras ainda maiores, podendo, inclusive, desbancar as indústrias de higiene pessoal e defensivos agrícolas, que juntas representam 13% do setor industrial químico no Brasil, acumulando 5,5 bilhões de dólares de faturamento.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Globo Rural, ano 9, n. 1, janeiro 1999.
- NEVES, João F. Curso de Tecnologia de Sabão. Rio de Janeiro: s.ed; 1987.
- TENSOATIVOS: Princípios fundamentais e aspectos práticos. Brasil, Rio de Janeiro, Henkel do Brasil, 1979.
- BRINK Jr., Josef A., SHREVE, R. Morris. Indústria de Processamentos Químicos. Rio de Janeiro, Guanabara Dois, 1980.
- VANIN, José Atílio. Alquimistas e Químicos: O Passado, O Presente e o Futuro. São Paulo, Moderna, 1994. 95p.
- SPITZ, Luis. Soap Technology for the 1990's. United States of América, American Oil Chemists' Society, 1997. 320p.

\* **Licenciado em Química pela PUCRS**  
([eduardogoldani@yahoo.com](mailto:eduardogoldani@yahoo.com))

---

## THE EDUCATION SYSTEM IN MALAYSIA

### PART II

The imperialist that left the greatest mark in Malaysia is the British. They are the last and also of the way they develop the colony. Like all imperialists they were only interested in exploiting the natural resources and wealth of the colony. However the British did this by establishing a group of locals to do the day to day management of the colony while they spent their time enjoying the good life. This group is today known as the civil service.

In order that every thing runs smoothly so that they can have more free time, they invested in training the people to conduct affairs according to the British system. They set up schools and taught the people how to read and write English. Of course they are only looking for capable people, not trying to provide education for all. They allowed others to have their own education system. The Chinese being very proud of their culture would insist of a Chinese Education. Similarly the Malay continued to have an education system using Malay as the medium of

instruction, without heavy emphasis on religious teaching.

By and by most Chinese and Indians realised that knowing the English language would enable them to get good paying jobs in the civil services; and also in the medical and legal services. So most people in larger towns (where most Chinese reside) are educated in the English schools while in smaller towns, Mandarin (the Chinese language) and Bahasa Melayu (the Malay language) were the norm.

So in the 1950s a child will go to school at the age of six. He (or she) would enter Primary One and spent the next six years learning the read and write in English, arithmetic (learning how to count), arts, geography, history, and other simple subjects. When he reached Primary Six there would be a national examination. Questions would be given to all the Primary Six pupils nationwide at the same time. The answers would be marked by a national

board of examiners. Depending on the grade obtained from all the subjects taken, the student would then go into Secondary One (or Form One). Those who failed would have to leave school and find a job or learn some other skills in the community.

The Secondary One students would then study up till Secondary Three when the school would decide whether he (or she) is good enough to study Science subjects (Mathematics, Physics, Chemistry, Physics and Biology). Those who did not do so well in their school grades would have to do General Science. The final national examination would be in Secondary Five. The student would graduate with a General Certificate of Education (GCE) with a Division (I, II or III), otherwise known as the Original Level (or O-Level). This examination was set by the British for all the Secondary Five students in all their colonies, and graded by a board of examiners under the control of the Cambridge University.

Because of this system the standard of education in Malaysia was very high. The local authority has no control over the difficulty of the examination and the teachers would have to make sure that they taught the subject to the degree and depth required by the programme (or syllabus).

After Secondary Five the better students were selected for another two years of education known as the Form Six (Lower and Upper). This was to prepare the students for a University education. Up till about the 1980s there was only one University in Malaya. The University of Malaya. Students in Malaya and Singapore would all compete to enter this University after graduating from the Upper Six with a Higher School Certificate, or the GCE A-Level. Of course those from rich families in most cases would go to England to further their study as they have passed the same examination as those students in England.

After independence, like all nations, the Malays, which made up about 60 per cent of the population and are in political control of Malaya, made Malay as the official language. So it started to introduce the Malay language (or Bahasa Melayu) as a subject in the school programme. However the Chinese were the ones who excelled all the time in examinations. They thought that just maybe if Malay is used as a medium of instruction it would give the Malays an opportunity to do just as well as the Chinese, as majority of the Malays have never taken to English. The village schools have always been using Malay as the medium of instruction. So in the 1990s the education system began to use Malay starting from Primary One. English language became just another subject in school. This not only made it harder for the teachers (who are not young any more and do not know the Malay language that well) to teach. Also there were problems with textbooks and teaching aids. Most

importantly the schools here cannot sit for the same examination as all the students in the United Kingdom.

Eventually the national examinations were set and marked in Malaysia itself. The GCE became the Malaysia Certificate of Education (or Sijil Persekolahan Malaysia, or SPM), and the A-Level became the Malaysia Higher Certificate of Education (Sijil Tinggi Persekolahan Malaysia, or STPM).

Another important social evolution is, with the British gone, most jobs in the civil service – government departments, the police, arm forces, etc – and now taken up by the Malays whom have referred to themselves as Bumiputras (or children of the soil). The Chinese being more business incline have no problem starting their careers in the private sector especially with the multi-national companies. This was especially as English is still very popular in towns. So they continue to speak and read English very well even though in school very little English was taught.

By the 1990s more universities were being set up in the country. Those who graduated with good STPM results continue to enter the universities. Those who cannot find a place in the local universities (or preferred a foreign degree) would leave for the United States of America, the United Kingdom, Australia or New Zealand to continue their study. However education overseas were costly and so in the 1980s the Chinese community began to set up their own college. The first was the Tungku Abdul Rahman College, commonly known as the TAR College. This allowed Chinese students who could not qualify for Form Six to continue with a Form Six education and then sit for the STPM to get another chance to enter the local universities.

By about 1995 the medium for education in Malaysia is almost entire – from Primary One to the universities - in Malay. This has many drawbacks for tertiary education. For one there are insufficient textbooks and reference books. Writing scientific textbooks in the Malay language does not pay, as the sale will only be confined to the few hundred students in Malay. Also it is difficult to recruit good lecturers, as foreigners will not be able to teach science in Malay. Most importantly it is difficult to get renowned professors from overseas to check on the standard of the course. For one the United Kingdom withdrew its recognition of the medical degree awarded by the universities. So it is difficult for the graduates to take up any specialist courses overseas.

So more Chinese and Indians were opting for foreign degrees. The business people saw an opportunity to make money from education. They went to the United States, United Kingdom, Australia, and New Zealand to make arrangement with universities there so that students can do some

courses in Malaysia and then proceed to the home universities for the final years. The overseas universities will then award the degree. This arrangement has the attraction that now even if you do not do very well, but sufficient well, and has the money to pay the fees you can continue to get a degree. There are now many such twinning programmes in Malaysia now.

The latest development, starting from the late 1990s, was for universities from Australia to set up a campus in Malaysia. So now students from outside Malaysia, example from Africa, India, the Middle East and China, can now come to Malaysia and study for an Australia degree. The advantage being the cost will be lower as food and accommodation in Malaysia cost less than that in Australia. Also there is less of a cultural shock as Malaysia is also a developing country. People do not have such a superiority complex.

**Writer: Dr Ng Swee Ching**  
[drscng@singnet.com.sg](mailto:drscng@singnet.com.sg).

#### SINGAPORE

After leaving Malaysia to be an independent nation, the Singaporeans continue to follow the British system of education. They continued with the GCE "O" Level and the "A" Level. They started the National University of Singapore using the University of Malaya campus in Singapore. They also have many polytechnics for those who were unable to enter Form Six. The polytechnics are colleges which focus on technical education. Of course students who did very well can still have an opportunity are allowed to enroll in the university.

Singapore is a very small nation of about 3 million people. To increase its manpower need it trying to attract students to come here to study and hopefully they would become citizens. So it now has more universities and private institutions which develop degree courses in Singapore. Many students (especially Chinese) from Malaysia, China and Indonesia are now studying in Singapore.

---

## AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE DE SISTEMAS CATALÍTICOS NÃO-METALOCÊNICOS NA POLIMERIZAÇÃO DE ETILENO.

Nara R. S. Basso, Cíntia Sauer, Fabiana Fim, Alexander Stello  
e-mai: [nrbass@pucri.br](mailto:nrbass@pucri.br). PUCRS: Faculdade de Química. Avenida Ipiranga 6681, prédio 12-A, 90619-900-Porto Alegre-RS.

### Resumo-Abstract

O complexo não-metalocênico,  $M(LL)Cl_2$ ,  $M=Zr$  e  $L=3$ -hidroxi-2-metil-4-pirona foi sintetizado. O complexo apresentou atividade catalítica na reação de polimerização de etileno em meio homogêneo em diferentes condições experimentais (solvente, temperatura, cocatalisador, e  $Al/M$ ). O complexo também apresentou atividade quando suportado em diferentes matrizes inorgânicas,  $SiO_2$ ,  $MgCl_2$ , e  $MgO$ .

Non-metallocene catalyst complex,  $M(LL)Cl_2$ , with  $M=Zr$  and  $L=3$ -hydroxy-2-methyl-4-pirone has been prepared. The Complex was found to be active for homogeneous ethylene polymerization under different experimental conditions (solvent, temperature, cocatalyst and  $Al/M$ ) and it was also shown to be active when supported on different inorganic carriers,  $SiO_2$ ,  $MgCl_2$  and  $MgO$ .

---

### Introdução

Estima-se que em 2004 serão produzidas 95 milhões de toneladas de poliolefinas em todo o mundo, isto significa que as poliolefinas tendem a substituir outros materiais usados atualmente, quer seja pelo seu menor custo, ou porque esses polímeros, por serem termoplásticos são de fácil processabilidade[1]. A produção de novos materiais poliméricos apresentando propriedades desejadas, pode ser obtida a partir do controle da criação de ramificações nas cadeias poliméricas e no controle da massa molecular. Existe um grande interesse na descoberta e desenvolvimento de novas famílias de catalisadores para a polimerização de  $\alpha$ -olefinas visando obter um controle cada vez maior sobre as propriedades dos polímeros resultantes. Pesquisas levaram à geração de sistemas catalíticos metaloceno/metilaluminoxano (MAO), reconhecidamente um dos principais avanços em ciência e tecnologia de polímeros das últimas décadas, não só devido à alta eficiência desses sistemas, mas, principalmente, pela sua versatilidade e capacidade de produção de polímeros com propriedades não antes obtidas[2]. Apesar de pesquisas acadêmicas e industriais terem sido conduzidas para o desenvolvimento de novos metalocenos com diferentes ligantes e novas propriedades para os polímeros, muitos esforços também foram feitos para o descobrimento de novos catalisadores para polimerização de olefinas. Assim, é grande o interesse na síntese de catalisadores não-metalocênicos com metais do grupo 4 da tabela periódica onde sistemas análogos aos metalocenos apresentam alta atividade na polimerização de olefinas. Neste sentido, ligantes como alcóxidos volumosos, amidas e bases de Schiff têm sido testados, intensificando-se as pesquisas, tanto na indústria como nos institutos de pesquisa das Universidades[3]. Sistemas catalíticos relativamente simples contendo ligantes alcóxidos baseados no acetilacetato[4] e no 3-hidroxi-2-metil-4-pirona têm sido relatados como ativos para a polimerização de  $\alpha$ -olefinas[5]. Recentemente nosso grupo de pesquisa relatou a síntese e a atividade catalítica de dois complexos de zircônio contendo ligantes bis(alcóxidos) a partir do 2-hidróxi-1,4-naftoquinona e do 3-hidróxi-2-metil-4-pirona[6].

Neste artigo apresenta-se a síntese e a atividade catalítica do complexo diclorobis(3-hidroxi-2-metil-4-pirona)zircônio(IV) ativo na reação de homopolimerização de etileno, em diferentes condições experimentais.

## Experimental

As reações foram executadas em atmosfera de argônio usando a técnica do tubo de Schlenk. Todos os solventes foram secos pelos métodos usuais existentes na literatura e mantidos em atmosfera de argônio.

### *Síntese do Diclorobis (3-hidróxi-2-metil-4-pirona)zircônio(IV).*

O complexo de zircônio, foi obtido através da adição do ligante, 3-hidroxi-2-metil-4-pirona, dissolvido em 10mL de tetrahidrofurano (THF) anidro, a uma solução de  $ZrCl_4$  (0,92g; 3,96mmol). A mistura foi agitada por 30 minutos na temperatura ambiente e depois filtrada. O produto foi lavado com éter etílico e recristalizado a partir de uma solução 50/50 diclorometano e hexano, resultando num sólido branco que foi caracterizado por RMN  $^1H$ ,  $^{13}C$ , IV e UV. O rendimento da reação foi de 70%. RMN  $^1H$  (DMSO)  $\delta$  8.48 (d, Ha,  $J$ 6.8Hz), 6.82 (d, Hb  $J$ 6.8Hz), 2.35 (s, 6H,  $CH_3$ ). RMN  $^{13}C$  (DMSO)  $\delta$  179.64 (C=O, C<sub>4</sub>), 158.09 (C<sub>6</sub>), 153.36 (C<sub>3</sub>), 152.19 (C<sub>2</sub>), 110.24 (C<sub>5</sub>), 14.78 ( $CH_3$ , C<sub>7</sub>); IV (KBr): 1609 ( $\nu_{C=C}$ ), 1557, 1478, 1274 ( $\nu_{C-O}$ ), 1203 ( $\nu_{C-O}$ )  $cm^{-1}$ ;  $\lambda_{max}$  (hexano): 247 nm. Análise Elemental calculado(%) para  $C_{12}H_{10}O_6Zr$  (412,34): C 34,93%, H 2,43%, encontrado C 34,96%, H 2,92%.

### *Polimerização*

As reações de polimerização de etileno foram executadas em reator conectado a um banho termostático, contendo um agitador mecânico com entrada para o argônio e para o monômero. MAO (metilaluminoxano) TEA (trietilalumínio) ou TIBA( trisobutilalumínio) foram usados como

cocatalisadores em diferentes razões de Al/M. Para cada experimento determinada quantidade de catalisador em uma suspensão de tolueno ou hexano era transferida para o reator em atmosfera de argônio. As polimerizações foram executadas em 1,6 atm, em diferentes temperaturas e tempos de reação. Os reagentes foram introduzidos no reator na seguinte ordem: solvente, cocatalisador, etileno e catalisador. Etanol acidificado (HCl) foi usado para promover a desativação do sistema, e os produtos da reação foram separados por filtração, lavados com etanol e secos a temperatura ambiente.

#### *Preparação do Catalisador Suportado*

Os catalisadores suportados foram preparados pelo método de grafting[5] Como suporte utilizou-se  $MgCl_2$  sem tratamento,  $MgO$  ativado a  $200^\circ C$  e  $SiO_2$  ativada a  $450^\circ C$ , sob vácuo ( $P < 10^{-4}$  mbar), durante 16h. O catalisador foi adicionado ao suporte em solução de tolueno com concentração de 0,5 % Zr/suporte. A suspensão foi agitada por 1 h a  $80^\circ C$ , seguida de filtração e lavagem com tolueno (12 x 2 mL). O sólido resultante foi seco sobre vácuo por 4 h. Os teores metálicos dos catalisadores obtidos, foram determinados por Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford (RBS).

#### *Caracterização dos catalisadores suportado*

Os teores metálicos dos catalisadores obtidos, foram determinados por Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford (RBS)[5]. Para análise de RBS as pastilhas foram prensadas (12 Mpa) e analisadas em um acelerador de íons de 3 MV (Tandetron), usando um feixe de  $He^+$  de 2.0 MeV.

#### *Caracterização do Complexo*

Os espectros de RMN de  $^1H$  e  $^{13}C$  foram obtidos em  $DMSO-d_6$  usando-se um instrumento Varian Inova 300 spectrometer. Os dados de IV foram determinados em um espectrômetro Michelson Series FT-IV usando-se KBr. Os espectros de UV foram feitos em uma célula especial em atmosfera inerte, usando-se hexano como solvente e analisados em um espectrômetro UV-Visible, tipo UV-1601PC Shimadzu.

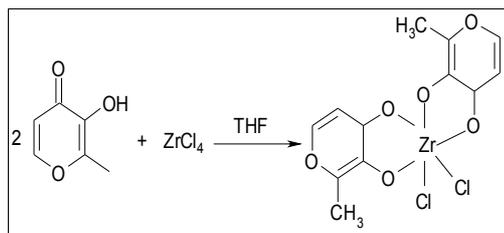
#### *Caracterização dos Polímeros*

Os pontos de fusão dos polímeros ( $T_m$ ) foram determinados em um calorímetro diferencial de varredura da Perkin Elmer, modelo DSC-4, usando-se um aquecimento de  $10^\circ C \cdot min^{-1}$  na faixa de temperatura de 30 a  $160^\circ C$ . O ciclo de aquecimento foi executado duas vezes, porém somente o último resultado foi considerado. As massas molares e distribuição de massas molares foram obtidas através de cromatografia de permeação em gel utilizando um instrumento da Waters, modelo 150C, equipado com um refratômetro diferencial e colunas Styragel HT (HT3, HT4 and HT6). Como solvente foi usado 1,2,4-triclorobenzeno a  $140^\circ C$ .

## **Resultados e Discussão**

### **Síntese do Complexo**

O complexo diclorobis (3-hidróxi-2-metil-4-pirona)zircônio(IV) foi preparado a partir da adição do ligante ao  $ZrCl_4$ , esquema 1. O complexo resultante é um sólido insolúvel nos solventes orgânicos comuns, o que dificultou a sua purificação e caracterização.



Esquema 1: Síntese do complexo diclorobis (3-hidróxi-2-metil-4-pirona)zircônio(IV).

O complexo de zircônio foi caracterizado por RMN de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , IV e CHN. A análise elementar do complexo indica que duas moléculas orgânicas foram incorporadas por fragmento de  $\text{ZrCl}_2$ . A figura 1 mostra o espectro do ligante (a) e do complexo de zircônio (b). Pode-se observar o desaparecimento do sinal referente ao hidrogênio do grupo hidroxila em 8,83ppm, figura 1a, no espectro do complexo, figura 1b, e o deslocamento dos sinais de ressonância para frequências mais altas em relação ao ligante livre. Os prótons no complexo estão desblindados, em relação ao ligante livre, devido a coordenação dos oxigênios dos grupos carbonila e hidroxila ao centro metálico diminuindo a densidade eletrônica dos prótons no complexo.

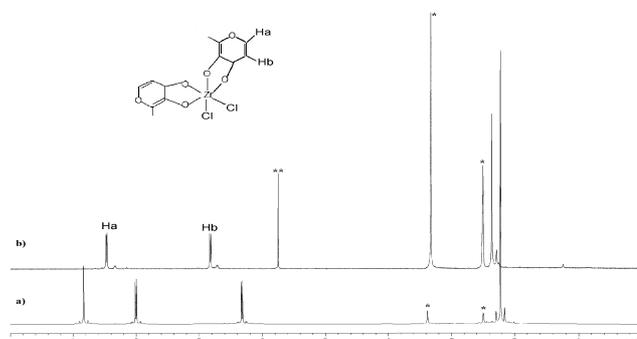


Figura 1: RMN  $^1\text{H}$  do ligante 3-hidroxi-2-metil-4-pirona (a) e do complexo diclorobis(3-hidroxi-2-metil-4-pirona)zircônio(IV) (b). \*DMSO; \*\* $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ .

O espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$ , figura 2a e 2b, mostra que os sinais de ressonância dos carbonos ligados aos átomos de oxigênio estão deslocados para frequências mais altas em relação ao ligante livre. Este deslocamento também sugere sua coordenação ao centro metálico.

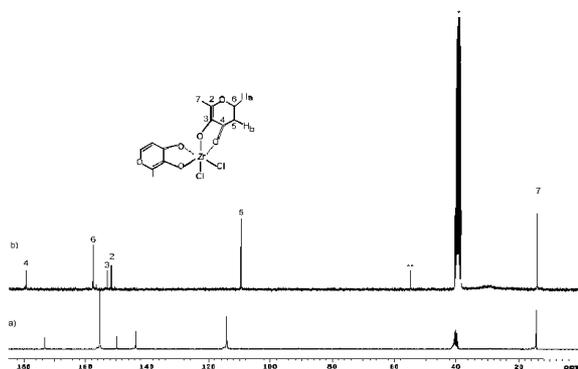


Figura 2: RMN  $^{13}\text{C}$  do ligante 3-hidroxi-2-metil-4-pirona (a) e do complexo diclorobis(3-hidroxi-2-metil-4-pirona)zircônio(IV) (b). \*DMSO; \*\* $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ .

No espectro de IV do complexo 2 observa-se o desaparecimento da banda referente a ligação OH e o deslocamento da banda da ligação C=O para frequências mais baixas quando o

complexo é formado devido a diminuição do caráter de ligação dupla deste grupo. A figura 3, a e b, mostra o espectro de UV do ligante e do complexo 2. Pode-se observar um deslocamento hipsocrômico da banda do complexo em relação ao ligante (de  $\lambda_{\text{máx}}$  273 nm para 247 nm). Este efeito pode ser atribuído a diminuição da conjugação das ligações duplas no complexo em relação ao ligante, devido a coordenação do grupo carbonila ao zircônio.

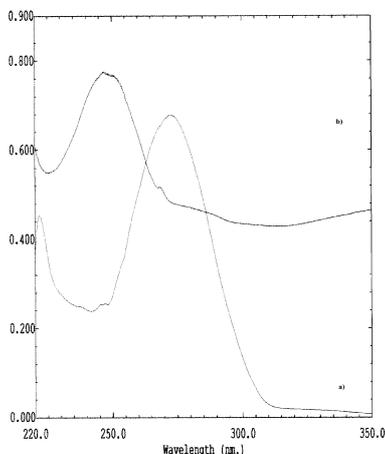


Figura 3: Espectro U.V. em hexano. (a) 3-hidroxi-2-metil-4-pirona,  $\lambda_{\text{máx}}$  273 nm, (b) diclorobis(3-hidroxi-2-metil-pirona) zircônio (IV),  $\lambda_{\text{máx}}$  247 nm.

### Polimerização

As atividades catalíticas do complexo diclorobis(3-hidroxi-2-metil-pirona)zircônio(IV), foi avaliada na homopolimerização de etileno em diferentes condições experimentais, em meio homogêneo e heterogêneo. A tabela 1 apresenta os resultados obtidos.

As reações de polimerização com o complexo de zircônio em meio homogêneo foi realizada em hexano, pois o mesmo mostrou melhor solubilidade neste solvente do que em tolueno, porém, resultou numa diminuição da atividade catalítica. Também foi avaliada a atividade usando-se triisobutilalumínio, TIBA e trietilalumínio, TEA, como cocatalisadores em hexano. O sistema TIBA/hexano resultando em um aumento da atividade catalítica quando comparada com o sistema MAO/hexano, mas uma diminuição em relação ao sistema MAO/tolueno. Porém o sistema TIBA/hexano diminui a atividade com a diminuição da  $[Al/Zr]$  ou temperatura de reação. O sistema TEA/hexano apresentou pequena atividade em qualquer das condições testadas.

A atividade catalítica do complexo também foi avaliada em diferentes suportes,  $SiO_2$ ,  $SiO_2/MAO$ ,  $MgCl_2$ , e  $MgO$  pois a aplicabilidade como catalisadores para polimerização depende em parte da capacidade de ser suportado em matrizes inorgânicas permitindo o uso da tecnologia nas presentes plantas para catálise Ziegler-Natta.

De acordo com as análises de RBS, os catalisadores suportados em  $MgCl_2$ , e  $SiO_2$  fixaram 0,3% Zr na superfície, enquanto que para o suporte  $MgO$ , a fixação de metal foi de 0,4% Zr/ $MgO$ .

Conforme mostra a tabela comparando a catálise homogênea com a suportada, a primeira mostrou uma maior atividade. A melhor atividade em meio heterogêneo foi observada para o sistema  $MgO$ /tolueno.

O complexo em meio homogêneo produziu polietileno com ponto de fusão e cristalinidade esperado para este tipo de produto, 135°C e 41%, respectivamente. Quando suportado em  $SiO_2$  ou  $SiO_2/MAO$  resultou em produtos com ponto de fusão, 133,5°C e 128,0°C e cristalinidade, 10% e 7%, respectivamente. O sistema  $MgO$  resultou num polímero com ponto de fusão igual a 131,8°C

e cristalinidade de 56%.

**Tabela 1.** Atividade catalítica do complexo diclorobis(3-hidroxi-2-metil-pirona)zircônio(IV),

Sistema	[Al/Zr]	Temperatura °C	Solvente	Cocat.	Atividade
Homogêneo	2500	60	Tolueno	MAO	180,0
Homogêneo	2500	60	Hexano	MAO	35,0
Homogêneo	2500	60	Hexano	TIBA	40,0
Homogêneo	2500	30	Hexano	TIBA	0,1
Homogêneo	500	60	Hexano	TIBA	0,1
Homogêneo	500	30	Hexano	TIBA	0,2
Homogêneo	2500	60	Hexano	TEA	0,3
Homogêneo	2500	30	Hexano	TEA	0,04
Homogêneo	500	60	Hexano	TEA	0,2
SiO <sub>2</sub>	2500	60	Tolueno	MAO	16,0
MAO/SiO <sub>2</sub>	2500	60	Tolueno	MAO	19,0
MgCl <sub>2</sub>	2500	60	Tolueno	MAO	8,9
MgO	2500	60	Tolueno	MAO	42,9

Condições de polimerização: T=60°C; [Al/Zr]=2500; Atividade: kg PE/molZr.h.atm. [Zr]=10<sup>-5</sup> mol.L<sup>-1</sup>, Pressão de etileno= 1,6atm; tempo: 60min

## Conclusões

Complexo não metalocênico de zircônio foi sintetizado a partir da reação da 3-hidroxi-2-metil-4-pirona com o tetracloreto de zircônio. O complexo diclorobis(3-hidroxi-2-metil-4-pirona) zircônio(IV), foi caracterizado por RMN de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, IV e CHN, apresentando atividade catalítica na polimerização de etileno em meio homogêneo e heterogêneo. O complexo foi suportado em diferentes matrizes inorgânicas, SiO<sub>2</sub>, MgCl<sub>2</sub>, e MgO. A melhor atividade para esse complexo foi observada em meio homogêneo, 180 kg PE/mol Zr.h.atm., quando o complexo foi suportado em MgO apresentou atividade de 42 kg PE/mol.Zr.h.atm.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte financeiro da FAPERGS, CNPq e CAPES.

## Referências Bibliográficas

4. a) W. Kaminsky. *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, **1998**, 1413. b) Disponível em: <[http://www.ptai.com/pages/newslwtters/vol\\_54.htm](http://www.ptai.com/pages/newslwtters/vol_54.htm)> Acesso em: 18/11/2003.
5. N. R. de S. Basso., C. Carone, V. de Lima, F. Albuquerque, P. Nunes, J. H. Z. Santos, G. B. Galland, F. C. Stedile, S. Einloft, *J. Mol. Cat A: Chemical*, **2004**, *208*, 285.
6. V. C. Gibson; S. K. Spitzmesser. *Chem. Rev.* **2003**, 103, 283.
7. a) L. Matiainen; M. Klinga; M. Leskelä. *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1996**, 216. b) A. Linden; C. J. Schaverien; C. G. Meijboom; A. G. Orpen. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 3008. c) F. G. Sernetz; R. Mulhaupt; S. Fokken; J. Okuda. *Organomet.* **1996**, 15, 5069. d) S. Fokken; T. P. Spaniol; H. C. Kong; W. Massa; J. Okuda. *Organomet.* **1996**, 15, 5075.
8. S. M. Einsen; M. Shmulison; M. Gallan-Fereres; A. Lisovskii; E. Nelkenbaum R. Semiat. *Organomet.* **2000**, 19, 1208.
9. P. Sobota; K. Przybylak; J. Utko, L. B. Jerzykiewicz; A. J. I. Pombeiro; M. F. Guedes da Silva; K. Szczegot. *Chem. Eur. J.* **2001**, 7, Nº5, 951.
10. (a) F. C. Stedile, J. H. Z. dos Santos, *Nucl. Instrum. Meth. B* **1998**, *1259*, 136-139; (b) F. C. Stedile, J. H. Z. dos Santos, *Phys. Stat. Sol.*, **1999**, *173*, 123.

# COMPUTER IMAGE ANALYSIS OF MALARIAL *PLASMODIUM VIVAX* IN HUMAN RED BLOOD CELLS

André von Mühlen, MS - California Polytechnic State University, San Luis Obispo  
Contact: andrevm@msn.com

## Introduction

This project aims to study computer image analysis of malarial parasites using morphological operators as its main method of approach. Malaria is a life-threatening parasitic disease transmitted through female *Anopheles* mosquitoes (1). It is found throughout the tropical and subtropical regions of the world (figure 1), and affects over 300 million people annually. As globalization, ease and frequency of travel increase, malaria cases may occur in any country (2). Over one million people die due to malaria every year (3).

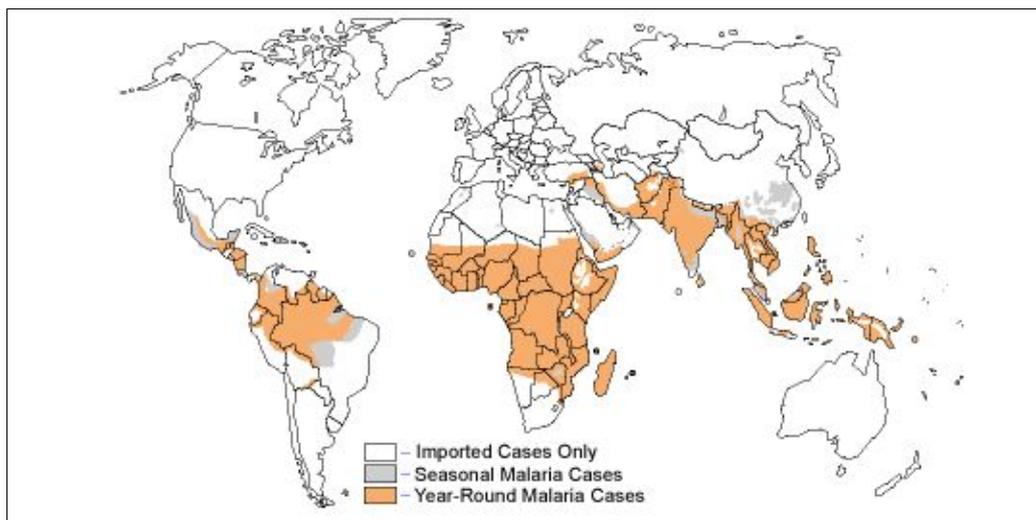


Figure 1. Prevalence of malaria around the world  
(Roll Back Malaria. Online. 28 March, 2004)

Malaria is a curable disease and is not an inevitable burden if those suffering from this infection have access to early diagnosis and prompt treatment (3). The “gold standard” for diagnosis involves examination of Giemsa-stained<sup>1</sup> thick and thin blood smears under a microscope by an expert in examination of blood smears for malaria parasites (4-5). This procedure is neither 100% sensitive nor 100% specific, since low-level parasitemia and mixed infections are frequently not detected. One study put the detection limit of microscopy at approximately 50 parasites/ $\mu$ l (6).

Additional methods exist to diagnose malaria, mainly rapid chromatographic assays (similar to a pregnancy test, a color bar shows up on the testing kit if the parasite is present). The main benefits of rapid tests are that they are quick to perform and easy to interpret, and they require no electrical equipment or specialized laboratory facilities (7). However, many negative issues regarding chromatographic tests are of concern: they are expensive (relative to blood films), do not quantify parasite load, have a delayed return to negative due to persistent antigenemia following successful treatment, most products cannot detect or differentiate between different plasmodia apart from *P. falciparum*, and they are not sufficiently sensitive at low parasitic densities (8).

The development of easy, rapid, and accurate tests for detecting malaria is highly desirable. Using the computer as a diagnostic tool, studies have shown that cancer causing skin lesions are identified reliably by image analysis algorithms, and have the potential to become a useful tool for clinicians (9-11). Counting cells and finding parasites in human blood is often challenging and time consuming, especially if many experiments are involved — for instance, in the research for new drugs. Thus, studies have evaluated a variety of methods for algorithms to evaluate sick cells (12-15).

<sup>1</sup> A stain that colors DNA only.

Unlike microscopy and rapid chromatographic assays, a software algorithm should be able to find parasites in any number of cells or quantity of blood; and the results should come out within minutes. Nonetheless, there are factors that influence the algorithm design that are not critical issues in the diagnosis methods described earlier: lighting variation between image samples, cell size in images, spacing between cells, and physical properties of parasites and white cells. The method of approach to counting cells is similar to Di Ruberto et al. (2002) (15), using a structural disk-shaped element and morphological operations to outline red cells; however, the method to finding the parasites is unique to a filter that delineates the morphology of the physical elements that make up the parasite inside a red cell.

## Methodology

A set of Giemsa-stained blood films was obtained from Brazilian universities for analysis. Six slides had malaria-infected blood smears, and eleven slides had healthy blood smears, which were used as a reference.

Thirty-two digital photographs — 16 with parasites and 16 without parasites in the image — were taken at the Cal Poly Biology Department, with an Olympus microscope BX60 and digital camera DEI-760D. Magnification was set at 1,000X. All images had 1280x1024 pixels.

The algorithm for this project had to consider a number of factors that affect both the overall cell count, and the parasite count. All cells in the images have a physical border around them; however they may not always be clear in digital images, since a large amount of light passes through their bodies. Furthermore, the cells in the pictures are not flat on the slide, but floating in plasma; hence some cells are actually on their side. Due to their 3-dimensional state, some portions of cells do not look as round as one might expect to see. The lack of uniform physical shape means the size of cells varies from 30-100 pixels in the images.

The amount of magnification also has an effect on the algorithm. Since some cells are deeper in blood plasma than others, and the depth of focus of the microscope is very small at 1000X (0.69  $\mu\text{m}$ ), some cells are out of focus on the images.

### Algorithm Code

The first step in this project involves taking the inverse of all images (i.e. black turns to white, white turns to black). This step is required so that points of interest (i.e. cells) are offset from the background prior to converting the image to binary (figures 2 and 3).

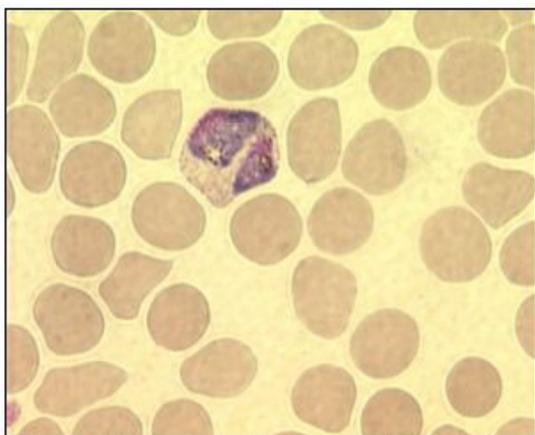


Figure 2. Sample image analyzed by algorithm

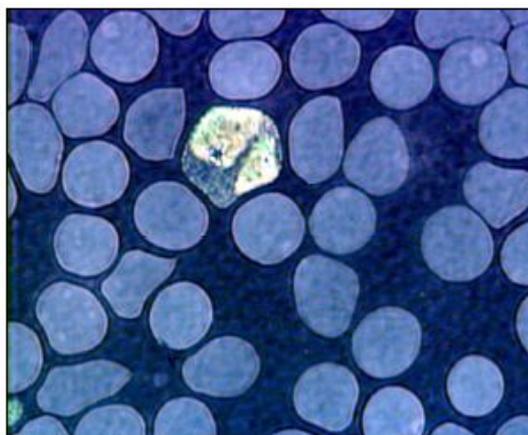


Figure 3. Inverse of sample image

After reading the inverse images into Matlab, the algorithm can process the cell and parasite count.

The algorithm starts by gathering global threshold level information needed for the binary command. This step highlights bright pixels as white, and dark pixels as black (20). Since the cells are lighter than the background, they receive a value of 1. The dark background receives a value of 0.

One limitation of this command is that a cell exceptionally out of focus may not be bright enough, and therefore not discernible from the background. When the image is turned to binary, the cell is dropped.

The color image is then processed to black and white (figure 4), with a binary command.

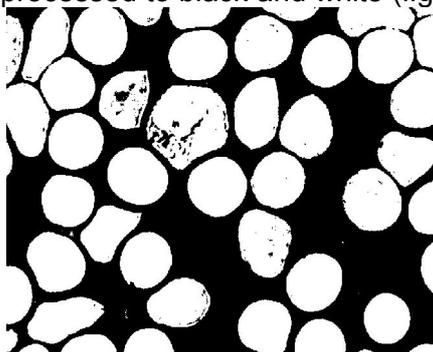


Figure 4. Binary of sample image

Some cells will show up with holes within them. The cause may be dark spots where not enough light came through, borders that are out of focus, or irregular elements inside, such as a malaria parasite or DNA in a white cell. To prevent these holes from causing cells to be dropped later in the algorithm, a command is used to fill them (figure 5).

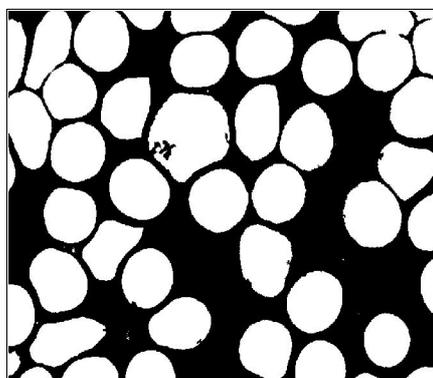


Figure 5. Image after holes were filled

The image at this point still has a few elements that are not relevant, including parts of cells on the periphery of the image (figure 6, arrow 1), and other small elements unknown to the author (arrows 2 and 3). To eliminate these items, a morphological opening is performed, consisting of an erosion and a dilation of the elements on the image (21-22). An essential part of these two operations is the structuring element used to probe the input image (23). A *disk* function is used to outline the shape of the cells — what the software is supposed to examine, and a radius (number of pixels) is input as the minimum size of the neighborhood of pixels being analyzed. Anything smaller is eliminated.

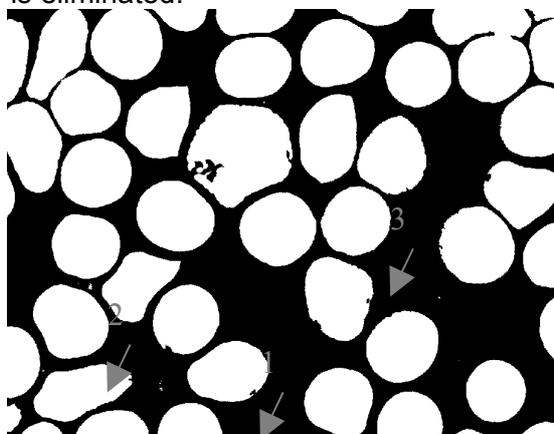


Figure 6. Small elements in sample image  
1. Part of a cell, 2-3. Unknown elements

See figure 7, the new image, clear of any elements smaller than 20 pixels. Notice how the cells have more of a rounded form. Small inlays on the edges are either erased or enlarged.

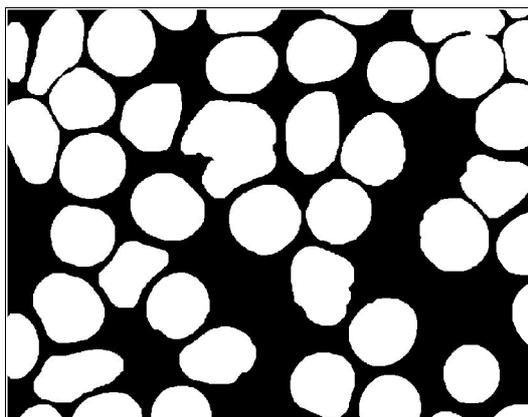


Figure 7. Sample image after morphological operation open

The radius value of 20 pixels provides the optimum count when one wants to use the exact same algorithm code for the entire set of images. However, images taken with a different blood film preparation, magnification, microscope, camera, set of lenses, etc. may have cells of different sizes, which require a different radius value.

Since it is often difficult to differentiate which type of cell is present on the periphery of an image, the algorithm removes them. The largest distance from the border that Matlab allows for analysis is 26 pixels; hence some cells stay in the output (figure 8).

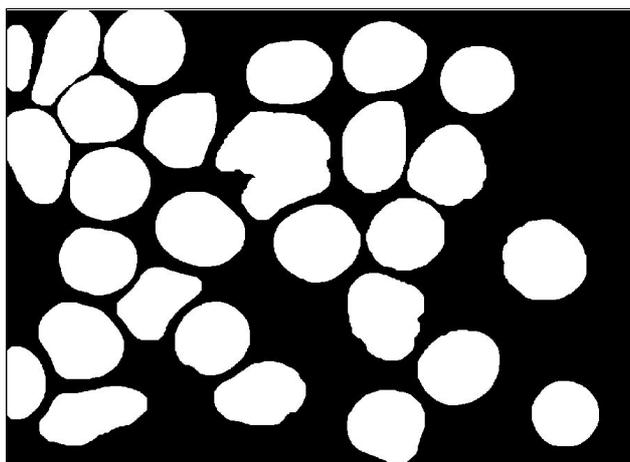


Figure 8. Sample image after clear border command

The Euler number command is now used to count the number of cells. It functions by considering patterns of convexity and concavity in local 2-by-2 pixel neighborhoods (20). The output for the image above is 28. A manual count of the image indicates there are in fact 28 cells present.

A pre-count of each image was performed manually where only the cells not touching the periphery of the image were considered. The sum for the image above was 28. Hence, while the algorithm erred in keeping certain cells on the borders (left side of figure 8) and dropping other interconnected cells (see top right of figure 7), it still returned the true count for this image. The implications of this output are detailed in the results and discussion portion of the project.

Two types of cells were found in the images: red and white cells. The computer algorithm has to differentiate between these two types of cells, since both infected red cells and white cells have DNA; which, when Giemsa-stained, have the same color. Healthy red cells do not have DNA. The algorithm takes into account the different physical shapes of each cell by performing a morphological top-hat filter on the inverse image using a structuring element with a 25-pixel disk-shaped radius of the inverse image.

As the *open* command removes narrow protrusions or spikes on the contour of cells, and tiny elements altogether, the top-hat filter reveals exactly these residues that the structuring element does not fit (24); hence, all the small elements inside sick red cells come up stronger in the output than healthy red cells (figure 9), or the edges of white cells.

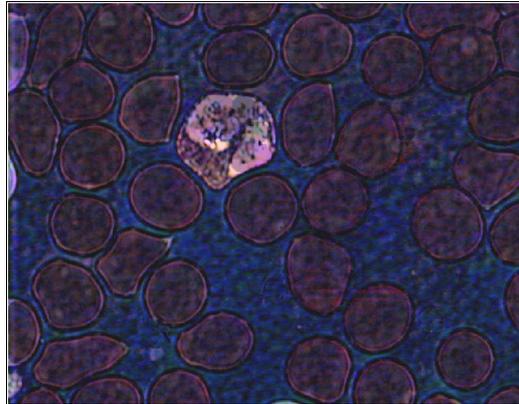


Figure 9. Sample image after top-hat filter

At this point, the algorithm needs the global threshold value discussed earlier to convert to binary. Using the same method discussed earlier, the image is converted to binary (figure 10).

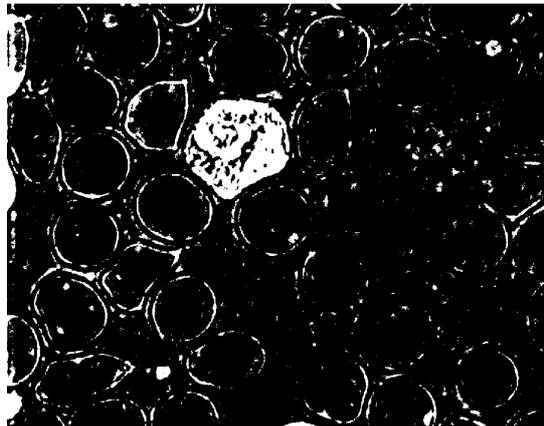


Figure 10. Binary of sample image with parasite

The holes are then filled to prevent the parasite from being dropped along with other smaller elements during the *open* (figure 11).

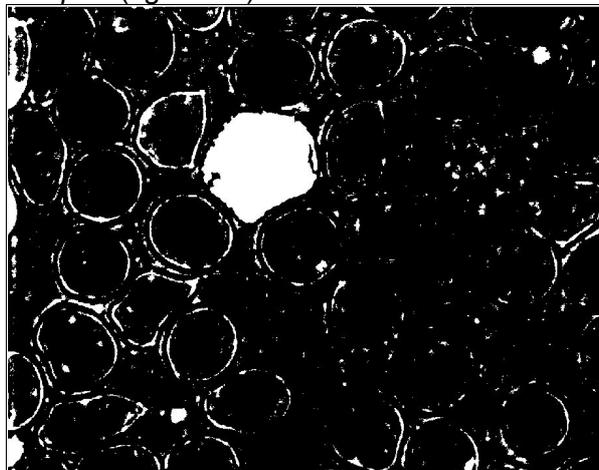


Figure 11. Sample image with parasite and holes filled

This command has limitations at this step. Depending on the thickness of the edge of a

red cell, the fill hole command fills a healthy cell's outline.

Figure 12 illustrates the result of an open with a pixel radius of 26.

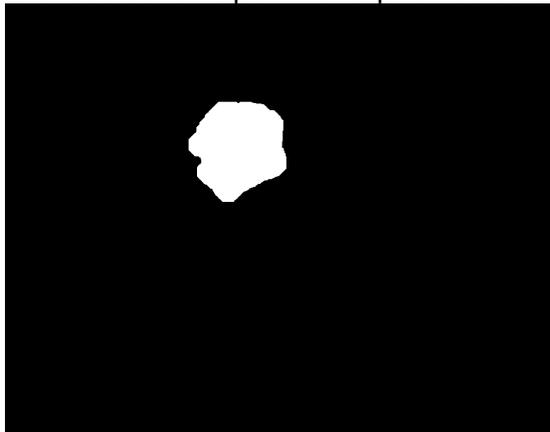


Figure 12. Sample image with parasite after morphological operation open

A smaller radius will not drop enough of the remnant elements on the image; while a larger radius will drop the smaller sick cells found in some images.

The last step in the algorithm is an Euler number command to find the number of parasites. The output is 1; which is correct.

See the entire algorithm code in table 1.

Code
<pre>clear I = imread('filename.png'); level = graythresh(I); bw = im2bw(I,level); figure, imshow(bw) bw2 = imfill(bw,'holes') figure, imshow(bw2) background = imopen(bw2,strel('disk',20)); figure, imshow(background) nobrd = imclearborder(background,26) figure, imshow(nobrd) eul = bweuler(nobrd) structure = strel('disk', 25); Itop = imtophat(I, structure); figure, imshow(Itop, []) level = graythresh(Itop); bw = im2bw(Itop,level); figure, imshow(bw) bw2 = imfill(bw,'holes') figure, imshow(bw2) background2 = imopen(bw2,strel('disk',26)); figure, imshow(background2) eul = bweuler(background2)</pre>

Table 1. Algorithm code

## Results

Table 2 shows the number of cells in each image per a manual count by the author (where only cells within the image boundaries are considered), whether there is a parasite or not in each image, the algorithm output for the total number of cells (includes white cells, and healthy and sick red cells), the actual number of sick cells, and the algorithm output for the number of sick cells.

Photo Number	Sick (YES/NO)	Actual Count: Total Number of Cells	Algorithm Count: Total Number of Cells	Actual Number of Sick Cells	Algorithm Count of Sick Cells
1	NO	25	24	0	0
2	YES	25	27	1	1
3	YES	24	24	1	1
4	YES	28	28	1	1
5	YES	24	30	1	1
6	NO	20	20	0	0
7	NO	15	15	0	0
8	NO	25	24	0	0
9	YES	13	14	1	1
10	YES	23	25	1	2
11	YES	30	30	1	1
12	YES	25	22	2	2
13	NO	21	17	0	0
14	NO	20	17	0	0
15	YES	34	37	2	2
16	YES	28	29	1	1
17	NO	16	16	0	0
18	NO	21	21	0	1
19	NO	19	19	0	0
20	NO	15	17	0	2
21	YES	23	28	0	0
22	NO	22	20	0	0
23	YES	18	18	1	1
24	YES	18	14	2	2
25	YES	27	28	1	1
26	YES	25	25	1	2

Table 2. Results of actual count and algorithm output

From the initial 32 images taken, only 26 were analyzed. Six images were dropped because the algorithm could not process them, leading to inconclusive results. There are three groups of reason that influenced this decision: blood film preparation, quality of images, and algorithm design.

Blood film preparation considers lack of spacing between cells, and other elements in the images the author could not identify. The better the spacing, the more accurate the count.

Quality of images considers focus, and too much or too little lighting through cells; hence they blend with the background. A set of images where every cell is in focus provides for better results.

Algorithm design considers limitations by the algorithm that should be worked out in future research.

Table 3 shows the total number of cells in all the images, the algorithm count, the total

number of sick cells, and the pertaining algorithm count. It also lists the total number of cells missed by the algorithm, healthy and sick. This information is used in the following equations to count the error rates of the algorithm for percentage of cells missed and over counted, and percentage of sick cells missed and over counted.

Actual Count: Total Number of Cells	Algorithm Count: Total Number of Cells	Total Number of Cells Missed	Actual Number of Sick Cells	Algorithm Count of Sick Cells	Total Number of Sick Cells Missed
584	589	19	17	22	1

Table 3. Total number of cells and parasites, and pertaining algorithm count total

$$\text{Percentage of cells missed} = \frac{\text{total number of cells missed}}{\text{total number of cells}} = \frac{19}{584} = 3.3\%$$

The algorithm missed 3.3% of the cells due to physical contact between cells. A lack of discernible separation between two cells is counted as one cell by the software. The border drop command also dropped whole cells touching partial cells on the border.

$$\text{Percentage of cells over counted} = \frac{\text{number of cells over counted}}{\text{total number of cells}} = \frac{77}{584} = 13.2\%$$

Cells over counted came from the border of the images and small unidentified elements. These were not counted in the manual count, hence the disparity of 13.2%.

$$\text{Percentage of sick cell cells missed} = \frac{\text{total number of sick cells missed}}{\text{total number of cells}} = \frac{1}{17} = 5.9\%$$

The algorithm missed one parasite an image. The cell had very dispersed elements and its binary cell image did not fill with the fill-hole command, hence it was dropped after the open. Note that another healthy cell was recognized as sick in the same image; thus, the correct count output for this image in table 2.

$$\text{Percentage of sick cells over counted} = \frac{\text{number of sick cells over counted}}{\text{total number of sick cells}} = \frac{5}{17} = 29.4\%$$

The algorithm erred in the count of sick cells by almost 30% over the actual number. The use of blood smears prepared for computer image analysis would decrease this number, due to overall better image quality. The blood smears available for this study were prepared solely for visual microscopy by an expert in malarial analysis. More emphasis on spacing between cells and an overall flat state by cells against the glass on the background would diminish errors.

## Discussion and Conclusions

This study found that the use of computer image analysis of digital images to count the number of cells and detect parasites in blood smears provides a valid diagnosis tool for malaria. Di Ruberto and collaborators were the first researchers to use computer image vision to detect malaria parasites. They used Matlab to count the number of cells by use of gray scale granulometries, and detected parasites by means of an automatic thresholding based on a morphological approach. In similar manner, this project uses morphological operators to count the number of cells; however, it uses a top-hat filter to detect parasites within cells. Both methods seem to provide similar results.

Table 5 outlines the sensitivity, specificity and accuracy of the algorithm — defined by the equations below (25). In table 4, the term *positive microscopy* represents the number of images that contain the malaria parasite; while negative microscopy represents images with only healthy cells. Algorithm positive represents images that the algorithm found a parasite, whether it was right or not; and algorithm negative represents images the algorithm did not find any parasite.

	Positive Microscopy	Negative Microscopy
Algorithm Positive	a	b
Algorithm Negative	c	d

Table 4. Actual presence of parasite vs. algorithm detection

$$\text{Sensitivity} = \frac{a}{a + c}$$

$$\text{Specificity} = \frac{d}{b + d}$$

$$\text{Accuracy} = \frac{(a + d)}{(a + b + c + d)}$$

Parasite	Positive Microscopy		Negative Microscopy		Sensitivity (%)	Specificity (%)	Accuracy (%)
	Algorithm Positive	Algorithm Negative	Algorithm Positive	Algorithm Negative			
<i>P. vivax</i>	14	0	2	10	100.0	83.3	92.3

Table 5. Sensitivity, specificity and accuracy of algorithm

The algorithm has high sensitivity, which is desirable since one would like a test of high success rate of detecting positive cases. Inability of the test to correctly identify a true positive might result in missing potential cases of the disease. Conversely, the test is not highly specific at 83.3%, hence there are false positives. Overall, the algorithm had an accuracy of 92.3%, which is considered good under clinical parameters.

The algorithm developed to find and count parasites is a novel alternative to current diagnostic methods. The software is able to find parasites in low quantities and quantify the extent of infection, all in less than five minutes. However, the use of computer image vision requires expensive equipment not available in many countries, mainly those affected by the epidemics. Microscopy continues to be the gold standard for the diagnosis of malaria.

#### Recommendations for Future Research

To increase the accuracy of the output, and diminish type I and II errors, the author suggests an algorithm that collects an array of results based on a large number of cycles. The algorithm would adjust one factor per cycle, and compare the output with all the previous runs until the results maintained some consistency; hence it would stop only when it reached a pre-determined consensus value (i.e. ten equal cell counts). Factors would include image brightness and contrast, open radius, structuring element radius for the top-hat filter, and perhaps a color overlay for the inverse image. Shades of blue, as seen in the inverse image, might not provide the best basis for collection of thresholding information to binary.

Furthermore, the preparation of the blood smears needs to take into account the purpose of the sample. The better the spacing between cells, the less likely the chance of type I and II errors; where multiple cells were counted as one, and one or more cells were dropped.

## References

1. What is Malaria? Roll Back Malaria. Online. 26 December 2003. <<http://www.rbm.who.int>>
2. Malaria: Laboratory Diagnosis. Online. 25 December 2003. <<http://www.rph.wa.gov.au>>
3. World Health Organization. A rapid dipstick antigen capture assay for the diagnosis of falciparum malaria. *74.11* (1996) 47-54
4. Bernard Henry, John. *Clinical Diagnosis & Management, by Laboratory Methods*. W.B. Saunders Company. Philadelphia (1991) 1168-1172
5. CJ Palmer, JA Bonilla, DA Bruckner, NS Miller, MA Haseeb, JR Masci, WM Stauffer. Multicenter study to evaluate the OptiMAL test for rapid diagnosis of malaria in U.S. Hospitals. *Journal of Clinical Microbiology*. *41.11* (November 2003) 5178-5182
6. J Iqbal, N Khalid, PR Hira. Comparison of two commercial assays with expert microscopy for confirmation of symptomatically diagnosed malaria. *Journal of Clinical Microbiology*. *40.12* (December 2002) 4675-4678
7. MH Craig, BL Bredenkamp, CH Vuaghan William, EJ Rossouw, VJ Kelly, I Kleinschmidt, A Martineau, and GFJ Henry. Field and laboratory comparative evaluation of ten rapid malaria diagnostic tests. *Transactions of the Royal Society of Tropical Medicine and Hygiene*. *96* (2002) 258-265
11. RE Coleman, N Maneechai, A Ponlawat, C. Kumptitak, N Rachapaew, RS Miller, and J Sattabongkot. Short report: failure of the OptiMAL rapid malaria test as a tool for the detection of asymptomatic malaria in an area of Thailand endemic for plasmodium falciparum and p. vivax. *American Society of Tropical Medicine and Hygiene*. *67.6* (2002) 563-565
12. H Voigt, and Classen R. Topodermatographic Image Analysis for Melanoma Screening and the Quantitative Assessment of Tumor Dimension Parameters of the Skin. *Cancer*. *75.4* (15 February, 1995) 981-988
13. JF Aitken, J Pfitzner, D Battistutta, PK O'Rourke, AC Green, NG Martin. Reliability of computer image analysis of pigmented skin lesions of Australian adolescents. *Cancer*. *78.2* (15 July, 1996) 252-257
14. TW Nattkemper, T Twellmann, H Ritter, W Schubert. Human vs. Machine: Evaluation of Fluorescence Micrographs. *Computer in Biology and Medicine*. *33* (2003) 31-43
15. H Satelet, O Garraud, M Lorenzato, C Rogier, I Milko-Sartelet, M Huerre, and D Gaillard. Quantitative Computer Image Analysis of Chondroitin Sulfate A Expression in Placentas Infected with Plasmodium Falciparum. *The Journal of Histochemistry & Cytochemistry*. *47.6* (1999) 751-756
16. Mohamed Sammouda, Rachid Sammouda, Noboru Niki, Kiyoshi Mukai. Liver cancer detection system based on the analysis of digitized color images of tissue samples obtained using needle biopsy. *Information Visualization*. *1.2* (Jun 2002) 130
17. R. Barthelson, C Hopkins, and A Mobasseria. Quantitation of bacterial adherence by image analysis. *American Journal of Microbiological Methods*. *38.1-2* (October 1999) 17-23
18. C Di Ruberto, A Dempster, S Khan, B Jarra. Analysis of Infected Blood Cell Images using Morphological Operators. *Image and Vision Computing*. *20* (2002) 20133-20146
19. Watershed Algorithm. Online. 10 April, 2004. <<http://rsb.info.nih.gov/ij/plugins/watershed.html>>
20. G. Adelman, Holger. Butterworth Equations for Homomorphic Filtering of Images. *Computers in Biology and Medicine*. *28* (1998) 169-181
21. CR Garcia, AR Dluzewski, LH Catalani, R Buring, J Hoyland, and WT Mason. Calcium Homestatic in Intraerythrocytic Malaria Parasites. *European Journal of Cell Biology*. *71.4* (December 1996) 409-13
22. Intro to PNG Features. Online. 29 March, 2004. <<http://www.libpng.org/pub/png/pngintro.html>>
23. Matlab 6.5 Help Reference. Software.
24. Morphological Operations. Online. 26 March 2004. <<http://rkb.home.cern.ch/rkb/AN16pp/node178.html>>
25. What Are Morphological Operations? Online. 26 March 2004. <<http://developer.apple.com/documentation/Performance/Conceptual/vImage/Chapter5/>>
26. Structuring Elements :: Morphological Operations (Image Processing Toolbox). Online. 19 April, 2004. <<http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/images/morph5.html#22581>>
27. Residues. Online. 30 April 2004. <<http://www.mmorph.com/mmtutor1.0/html/mmtutor/mm045residues.html>>
28. Sensitivity and Specificity. Online. 2 May 2004. <<http://www.poems.msu.edu/InfoMastery/Diagnosis/SensSpec.htm>>

## Catalytic converter: a great allied at polluting gases.

\* Eduardo Goldani

As of the 1950's, after World War II, Brazil took part in a big industrialization process, most of all automotive industries which, attracted by cheap and abundant man labor, as well as a promising and unexplored market, came in a great numbers to the country, mainly to the Southeastern region. Up until then, other means of transportation which polluted less, such as trains and trams, were the most used. From then on, the amount of vehicles on the streets of big cities has increased steadily not only in Brazil, but also in other cities around the world. Today an estimated fleet of over 500 million cars ride on the streets and avenues of the five continents. This growing number of vehicles along with a high concentration of manufacturing industries caused the amount of pollutants thrown daily into the atmosphere to reach a very high level, thereby, seriously harming people's health.

The atmosphere became one of the most convenient places for depositing undesirable materials, due to the fast movement of its fluid mean, causing a great number of environmental problems. Acid rain and greenhouse effect are presently among the main problems, this last one is caused by gases which are both chemically stable and inert enough to accumulate in the atmosphere, such as carbon dioxide, methane, nitrogen oxides, and the chlorofluorocarbons - CFC's. The automobile is one of the agents which most contributes towards air pollution. This can easily be observed in urban areas where smog, which is a result of the interaction among nitrogen oxides, hydrocarbons and sun light (ultraviolet rays), results in oxidation products, that cause sore eyes, respiratory difficulties and damage to plants.

Otto cycle engines (combustion engines present in automobiles) generates in its exhaustion a complex mixture of pollutants constituted by carbon monoxide and dioxide, nitrogen oxides, hydrocarbons and sulfur dioxide contributing directly towards smog and other types of pollution. The concentration of these compounds, above acceptable levels, interferes directly in the life quality of the big

city inhabitants, since these pollutants affect their respiratory system and, consequently, their health.

Starting in the 70's, aiming to lessen the present of these pollutants in the atmosphere, some countries establish restrictive legislation regarding CO, NO<sub>x</sub> and hydrocarbons emissions. This fact motivated the development of the catalytic converter which is presently used worldwide.

But, after all, what is a catalytic converter? It's a device located in the car's exhaust system, soon after the gas collector and near the engine to take better advantage of the temperature resulting from the combustion to convert the toxic gases generated at the combustion – CO, NO<sub>x</sub> and hydrocarbons – in less pollutants gases such as CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O<sub>(v)</sub>. To convert the gases generated, the catalytic converter performs a series of chemical reactions in its interior which uses, as a support, a ceramic material in the shape of a beehive: cordierite – (Mg, Fe)<sub>2</sub>Al<sub>4</sub>Si<sub>5</sub>O<sub>18</sub>.nH<sub>2</sub>O. This transformation of the gases has no relationship to the filter. The catalytic material is deposited in this support (where chemical reactions will occur) composed of alumina with high specific area, over which actives elements such as Platinum (Pt), Palladium (Pd), Rhodium (Rh) and promoters, like CeO<sub>2</sub>, aside from other elements such as Nickel (Ni), Zirconium (Zr), Barium (Ba) and Lanthanum (La).

Basically, the catalytic effect of this catalytic converter is due to the noble metals aided by CeO<sub>2</sub>, the desired products, (carbon dioxide, nitrogen and water steam), are thermodynamically favored at typical exhaustion temperatures, (770K), that's why the catalytic converter is located near the engine, to make better use of the heat generated by it and reach the ideal temperature that will make the reactions take place.

In Brazil, the control of the gases generated by vehicles started in 1997 with the air pollution control program called PROCONVE that obliged the manufactures to install the catalytic converter in all

manufactured vehicles in order to reduce the pollutants emitted by them. Programs like this, along with others, connected to the most diverse industries installed in Brazil, have contributed to improve the quality of the air in the last few

years, causing fewer hazards to the health of our population.

What would the quality of the air in big cities be like without the presence of catalytic converter? Let's not even imagine!

\* Chemistry teacher graduated at PUCRS  
([eduardogoldani@yahoo.com](mailto:eduardogoldani@yahoo.com))

## INSTRUÇÕES PARA PUBLICAÇÃO

### INSTRUCTIONS FOR PUBLICATIONS

1. O Periódico Tchê Química publica artigos inéditos em todos os campos da Química e áreas afins, artigos de revisão bibliográfica de assuntos específicos, comunicações científicas e resenhas de livros.

1. Periódico Tchê Química publishes original work in all areas of chemistry, review papers on specific subjects, short communications and book reviews.

2. Artigos originais incluem um resumo com preferência à língua inglesa, sob título de "Abstract", para expor, de modo claro e compreensível, o conteúdo do trabalho sem generalidades e detalhes de metodologia.

2. Original papers should include an abstract with preference written in English, under the title "Abstract", explaining clearly the contents of the article. This abstract should not contain general and experimental details.

3. Os trabalhos devem ser submetidos para o endereço eletrônico [tchequimica@he.com.br](mailto:tchequimica@he.com.br), em formato Word for Windows®. O cabeçalho é constituído pelo título do trabalho, nome(s) do(s) autor(es) e respectivas instituições. As tabelas e figuras devem ser inseridas no corpo do texto, em espaços adequados e perfeitamente visíveis. A nomenclatura deve obedecer às normas da IUPAC.

3. Manuscript should be submitted to [tchequimica@he.com.br](mailto:tchequimica@he.com.br), in Word for Windows®. Manuscript headings must include title, author name(s) and institution(s) where the work was done. Tables and figures must be sent in the text body appropriate and visible. Nomenclature should conform to IUPAC rules.

4. Citações bibliográficas no texto devem ser feitas por nome e ano entre colchetes. A lista de referências bibliográficas, ao fim do trabalho, deve ser organizada por ordem alfabética sequencialmente numerada, seguindo ao seguinte modelo:

1. CAVALCANTE, A. A. M., Rübensam, G., Picada, J. N., da Silva, E. G., Moreira, J. C. F., Henriques, J. A. P., *Mutagenicity, antioxidant potential and antimutagenic activity against hydrogen peroxide of cashew (Anacardium occidentale) apple juice and Cajúina*, Environmental and Molecular Mutagenesis 41:5 (2003) 360-369;

4. Bibliographic citations in the text must be done by author name and year between brackets. The bibliographic lists, at the end of the text, must be organized by alphabetical order and sequential numeration, obeying the following model:

1. CAVALCANTE, A. A. M., Rübensam, G., Picada, J. N., da Silva, E. G., Moreira, J. C. F., Henriques, J. A. P., *Mutagenicity, antioxidant potential and antimutagenic activity against hydrogen peroxide of cashew (Anacardium occidentale) apple juice and Cajuína* Environmental and Molecular Mutagenesis 41:5 (2003) 360-369;

5. O Conselho Editorial poderá fazer alterações no texto do trabalho, para adequá-lo a estas instruções.

5. The Editorial Board may perform modifications in the text to make adequate to these rules.

---

### AGRADECIMENTOS / THANKS.

O Grupo Tchê Química agradece a todas as pessoas que colaboraram para a publicação desta segunda edição do Periódico Tchê Química, em especial:

- **Jerson Kelman**
- **Dr Ng Swee Ching**
- **Pierre Lehmann**
- **Professor Dr. Frank Wilczek**
- **Bibliotecário Ednei de Freitas Silveira**
- **Bibliotecária Iara Breda de Azeredo**
- **Felipo Oliveira** (equipe técnica, felipo@portoweb.com.br)
- **Marco Antonio Marchessano Pereira** (equipe técnica, marco@fapergs.rs.gov.br)

\* Agradecimentos especiais aos professores Dr. Frank Wilczek, Dr. Pierre Lehmann e Dr Ng Swee Ching. À dedicação, empenho, disposição e boa vontade destes professores, que, mesmo estando a milhares de quilômetros de distância, ajudaram a fortalecer os laços de amizade que unem as nossas nações e tornar essa revista gratuita ainda melhor.

\* Special thanks to professors Dr. Frank Wilczek, Dr. Pierre Lehmann e Dr Ng Swee Ching. The devotion, persistence, disposal and good will of those professors, who being thousand of kilometers of distance, have helped to fortify the friendship bows that join our nations and to become this free magazine better

---

### DIVERSOS / MISCELÂNEA

Você já conhece os outros aplicativos e serviços oferecidos pela Tchê Química? Entre os inúmeros produtos e serviços prestados gratuitamente pela Tchê Química destacam-se a revista que você leu, o serviço de News Later (TchêAvisa), a associação ao site, que fornece acesso a mais conteúdo, e o serviço Tchê Química em Yahoo Groups, disponível no endereço <<http://br.groups.yahoo.com/group/tchequimica/>>

Entre os aplicativos didáticos desenvolvidos pela Tchê Química oferecemos as seguintes opções:

- Tabela Periódica 0.2, Disponível em: <<http://baixaki.ig.com.br/site/detail15983.htm>>
- Tabela Periódica Interativa 1.0.1, Disponível em: <<http://baixaki.ig.com.br/site/detail17510.htm>>
- Periódico Tchê-Química 1, Disponível em: <<http://baixaki.ig.com.br/site/detail15984.htm>>
- DEVERSAE 1.0.2, Disponível em: <<http://baixaki.ig.com.br/site/detail16288.htm>>
- Biodiesel Beta, Disponível em: <<http://baixaki.ig.com.br/site/detail18497.htm>> **NOVO / NEW**

A cada dia nossos serviços se tornam melhores, por isto não deixe de nos visitar em [www.tchequimica.tk](http://www.tchequimica.tk) ou [www.tchequimica.cjb.net](http://www.tchequimica.cjb.net).