



Organização
das Nações Unidas
para a Educação,
a Ciência e a Cultura



União Internacional
de Cristalografia




Parceiros do Ano Internacional da Cristalografia 2014

A Cristalografia importa!



Ano Internacional da Cristalografia 2014





Publicado pela Organização das Nações Unidas
para a Educação, a Ciência e a Cultura
7, place de Fontenoy, 75352 Paris 07 SP, França

© UNESCO 2014
Todos os direitos reservados

Título original: Crystallography matters!

Coordenadora/editora: Susan Schneegans

Fotos da capa: Avion © Shutterstock/IM_photo / Scientifique en Afrique @ FAO
Fotos da contracapa: Jeune famille regardant la télévision @ Shutterstock/Andrey_Popov

Diagramação e impressão: UNESCO

Impresso na França

CLD 446.14

O que é a cristalografia?

Os cristais podem ser encontrados em toda a Natureza. Eles são particularmente abundantes em formações rochosas, como minerais (pedras preciosas, grafite, etc), mas também em outros locais, como nos flocos de neve, no gelo ou nos grãos de sal. Desde tempos longínquos, os estudiosos ficaram intrigados com a beleza dos cristais, a sua forma simétrica e a variedade de cores. Estes primeiros cristalógrafos usavam a geometria para estudar a forma dos cristais no mundo natural.

No início do século XX, foi demonstrado que os raios-X podiam ser usados para "observar" a estrutura da matéria sem a deformar. Este episódio marcou o aparecimento da cristalografia moderna. Os raios-X foram descobertos em 1895, consistindo em feixes de luz que não são visíveis pelo olho humano. Quando os raios-X atingem algo, os átomos desse objeto provocam a dispersão dos raios. Os cristalógrafos descobriram que, no caso específico dos cristais, a distribuição uniforme dos átomos espalhava os raios em apenas algumas direções. Medindo estas direções e a intensidade desses feixes, os cientistas conseguiram produzir uma imagem tridimensional da estrutura atômica de um cristal. Assim, os cristais foram considerados objetos fundamentais para estudar a estrutura da matéria a um nível atômico ou molecular, graças ao facto de serem sólidos, tridimensionais e construídos a partir de uma disposição uniforme e frequentemente muito simétrica de átomos.

Através da cristalografia dos raios-X, os cientistas puderam estudar as ligações químicas que atraem um átomo para outro. Consideremos, por exemplo, a grafite e o diamante. Estes minerais são, à partida, bastante diferentes: um é opaco e leve (a grafite é usada para fazer lápis), enquanto o outro é transparente e duro. Contudo, a grafite e o diamante são bastante semelhantes do ponto de vista químico, pois são ambos compostos de carbono. É a capacidade de dispersar a luz – provocada pela estrutura das suas ligações químicas - que fornece ao diamante o brilho. Sabemos isto graças à cristalografia dos raios-X.

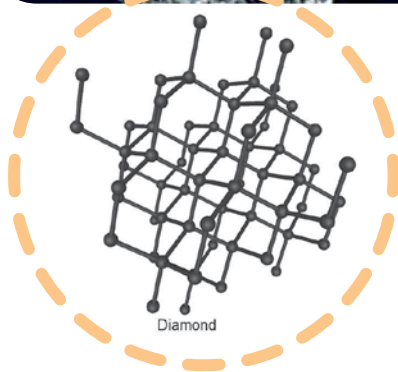
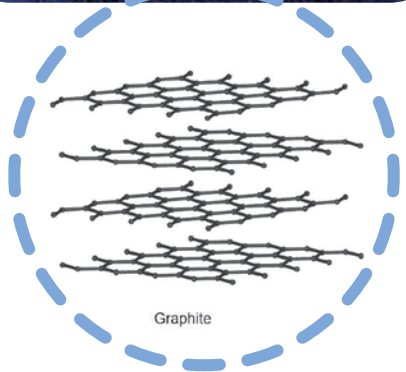
No início, a cristalografia dos raios-X só podia ser usada para olhar para cristais sólidos com uma disposição uniforme de átomos. Podia, por exemplo, estudar minerais e muitos outros compostos, como o sal ou o açúcar. Podia também estudar o gelo, mas apenas até ele derreter. Isto porque, num líquido, o movimento das moléculas tornava impossível a interpretação de um feixe disperso. Os cristalógrafos descobriram que



Os flocos de neve são cristais. A sua simetria hexagonal resulta da ligação existente entre as moléculas de água. Imagem: Wikipedia Commons



Uma amostra de grafite (figura à esquerda) e um diamante bruto (figura à direita). Estes dois cristais podem ser aparentemente muito diferentes, mas são, na verdade, muito parecidos, pois são ambos compostos de carbono. O que dá ao diamante o brilho é a capacidade de dispersar luz, à custa da estrutura das suas ligações químicas. Fotos: Wikipédia



A estrutura do cristal de grafite (à esquerda) difere consideravelmente daquela do diamante. © IUCr

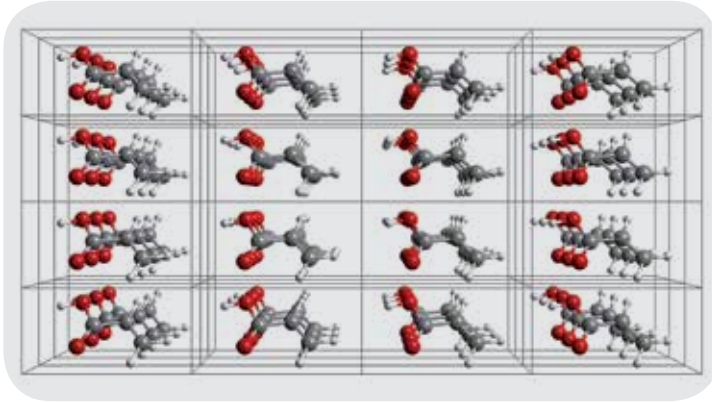


Imagem 3D da estrutura de um cristal. Num cristal, átomos, grupos de átomos, iões ou moléculas têm uma disposição uniforme em três dimensões.

© IUCr

poderiam estudar materiais biológicos, como proteínas ou ADN, transformando-os em cristais. Desta forma, o alcance da cristalografia estendeu-se à biologia e à medicina. Esta descoberta surgiu numa altura em que o crescimento do potencial dos computadores tornou possível a modelação da estrutura destes cristais mais complexos.

Após 100 anos de desenvolvimento, a cristalografia dos raios-X tornou-se a técnica de referência para estudar a estrutura atómica e as propriedades dos materiais. Atualmente, está no centro dos avanços em vários domínios científicos. Novos métodos cristalográficos estão a ser introduzidos e novas fontes (eletrões, neutrões e sincrotrões de luz) ficaram disponíveis. Esta evolução permitiu aos cristalógrafos estudar a estrutura atómica de objetos que não são cristais perfeitos, incluindo quasi-cristais (*ver caixa*) e cristais líquidos.

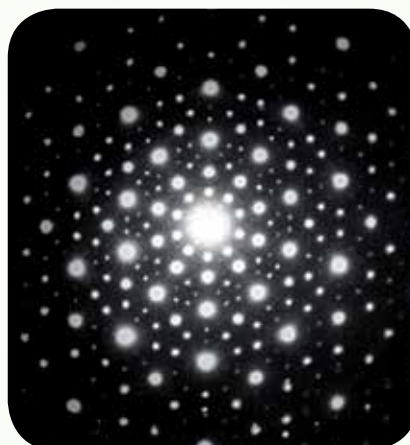
O desenvolvimento de máquinas capazes de gerar luz intensa e raios-X (sincrotrões) revolucionou a cristalografia. Grandes instalações de investigação, contendo sincrotrões, foram usadas pelos cristalógrafos, trabalhando em áreas como biologia, química, engenharia de materiais, física, arqueologia e geologia. Por exemplo, os sincrotrões permitiram aos arqueólogos estimar com precisão a composição e a idade de artefactos com dezenas de milhares de anos e aos geólogos analisar e datar meteoritos e rochas lunares.

QUÁSI-CRISTAIS: DESAFIANDO AS LEIS DA NATUREZA

Em 1984, Dan Shechtman (Israel) descobriu a existência de um cristal em que os átomos estavam dispostos num modelo que não podia ser estritamente repetido. Isto desafiava a teoria vigente sobre a simetria dos cristais. Até aí, pensava-se que os cristais eram necessariamente formas geométricas com 1, 2, 3, 4 ou 6 lados, dado que estas eram as únicas formas que se conseguia reproduzir em três dimensões.

Na altura, quando Shechtman observou uma liga de alumínio e magnésio num microscópio eletrónico, ele descobriu um pentágono (uma forma com 5 lados). Este resultado surpreendente e excêntrico (*outlaw*) viria a ser conhecido como um quasi-cristal. Foi com esta descoberta inovadora que, em 2011, Shechtman venceu o Prémio Nobel da Química.

Devido à forma como os respetivos átomos estão dispostos, os quasi-cristais têm propriedades raras: são duros e frágeis e têm um comportamento semelhante ao do vidro, sendo resistentes à corrosão e à aderência. São hoje usados em várias aplicações industriais, como acontece nas painéis antiaderentes.



Fonte: imagem de um padrão de difração, *Physical Review Letters* (1984), vol. 53, páginas 1951–1953; mosaico, Associação Marroquina de Cristalografia.

Há centenas de anos que os artesãos marroquinos (*Maalems*) conhecem os padrões dos quasi-cristais. Seis séculos separam estas duas imagens. A imagem à esquerda mostra o padrão de difração de um quasi-cristal, obtido, em 1984, por Dan Shechtman. Na figura à direita, vemos um belo mosaico (*zellij*) presente na *Attarine Madrasa*, em Fez (Marrocos), datada do século XIV. As imagens têm aparentemente grandes semelhanças, dado que ambas são constituídas por padrões pentagonais.

Uma breve referência histórica

Ao longo da história, a beleza e o mistério dos cristais causou um grande fascínio. Há dois milénios, o naturalista romano Plínio, o Velho, reconheceu a regularidade dos prismas hexagonais dos cristais rochosos. Na época, o processo de cristalizar açúcar e sal já era conhecido pelas antigas civilizações chinesa e indiana. Os cristais de açúcar eram, na Índia, obtidos através do sumo de cana-de-açúcar, enquanto, na China, a solidificação da água salgada gerava os respetivos cristais. A cristalização foi também desenvolvida no Iraque, no século VIII. Dois séculos mais tarde, no Egito e na atual região espanhola da Andaluzia, foi dominada uma técnica que consistia em cortar cristais rochosos para o uso em utensílios e objetos decorativos. Um exemplo é a caixa de joias presente na figura, construída no Egito entre os séculos XII e XIII. Em 1611, o matemático e astrónomo germânico Johannes Kepler foi o primeiro a reparar na forma simétrica dos flocos de neve e, a partir dessa observação, conjecturou a respetiva estrutura. Menos de 200 anos depois, o mineralogista francês René Just Haüy descobriria a lei geométrica da cristalização.



Caixa decorada com pérolas e pedras preciosas.
 © Museu de Cluny, França

Em 1895, os raios-X foram descobertos por William Conrad Röntgen, o primeiro galardoado com o Prémio Nobel da Física (1901). Contudo, foram Max von Laue e os seus colaboradores que mostraram que os raios-X incidentes sobre um cristal interagem com ele e, dependendo da natureza deste, se espalham em direções específicas. Esta descoberta valeu também a von Laue, em 1914, o Prémio Nobel da Física.

Igualmente importante foi a descoberta de William Henry Bragg e William Lawrence Bragg (pai e filho), em 1913, de que os raios-X podiam ser usados para determinar com precisão a posição dos átomos no interior de um cristal e, assim, apresentar a respetiva estrutura tridimensional. Conhecida como Lei Braggs, esta revelação teve um contributo fortíssimo para o desenvolvimento moderno de todas as ciências naturais, dado que a estrutura atómica é um aspeto chave nas propriedades químicas e biológicas da matéria e a estrutura cristalina é fundamental na maior parte das propriedades físicas.

Entre 1920 e 1960, a cristalografia dos raios-X ajudou a deslindar muitos dos mistérios da estrutura da vida, com importantes consequências na medicina. Por exemplo, Dorothy Hodgkin revelou a estrutura de um grande número de moléculas biológicas, incluindo o colesterol (1937), a vitamina (1945), a penicilina (1954) e a insulina (1964). Hodgkin foi premiada com o Nobel da Química, em 1964. Sir John Kendrew e Max Perutz foram os primeiros a elaborar a estrutura cristalina de uma proteína, o que lhes valeu o Prémio Nobel da Química, em 1962. Desde essa impressionante descoberta, a estrutura cristalina de mais de 90.000 proteínas, de ácidos nucleicos e de outras moléculas biológicas foi determinada recorrendo à cristalografia dos raios-X.

Um dos grandes marcos científicos do século XX foi a descoberta, por James Watson e Francis Crick, da estrutura cristalina do ADN. O que é provavelmente menos conhecido é o facto desta descoberta ter sido baseada nas experiências de difração realizadas por Rosalind Franklin, que morreu prematuramente em 1958. A descoberta da dupla-hélice abriu caminho para a cristalografia das proteínas e das macromoléculas, fundamental para a Biologia e para a Medicina atuais. Watson e Crick foram galardoados com o Nobel da Medicina de 1962, partilhando o prémio com Maurice Wilkins, que tinha trabalhado com Rosalind Franklin.

Nos últimos 50 anos, a cristalografia e os métodos cristalográficos continuaram o seu processo evolutivo. Por exemplo, o Prémio Nobel da Química de 1985 foi atribuído a Herb Pauntman e Jerome Karle, pelo desenvolvimento de novos métodos de análise nesta área. Como consequência, a estrutura cristalina de um grande número de compostos foi sendo revelada.

Prémios Nobel recentes foram atribuídos a Venkatraman Ramakrishnan, Thomas Steitz e Ada Yonath (2009), por identificarem a estrutura do ribossoma e a forma como é interrompido por antibióticos (*ver página 8*), a Andre Geim e Konstantin Novoselov (2010), pelo seu trabalho inovador sobre o grafeno, o primeiro de uma nova classe de materiais cristalinos bidimensionais com propriedades mecânicas e eletrónicas únicas, a Dan Shechtman (2011), pela descoberta dos quási-cristais (*ver página 2*), e a Robert Lefkowitz e Brian Kobilka (2012), por revelarem o funcionamento interno de uma importante família de recetores celulares, que comandam grande parte das funções do corpo humano.

Ao longo dos últimos 100 anos, 45 cientistas venceram Prémios Nobel pelo seu trabalho relacionado com a cristalografia (de forma direta ou indireta). Não há espaço para os citar a todos nesta brochura, mas é graças aos seus contributos individuais que a cristalografia se tornou transversal e fundamental a todas as ciências. Na atualidade, continua a ser um terreno fértil para novas e prometedoras investigações.

Por que devem os países investir na cristalografia?

A cristalografia é fundamental para o desenvolvimento de praticamente todos os **novos materiais**, desde cartões de memória informáticos até ecrãs televisivos ou componentes de automóveis ou aviões. Os cristalógrafos não estudam só a estrutura dos materiais, mas também usam o seu conhecimento para modificar a estrutura, para lhes dar novas propriedades ou proporcionar-lhes um comportamento diferente. Assim, os cristalógrafos podem também estabelecer uma nova "impressão digital". Uma empresa pode usar este facto para, quando regista a patente de um material, provar que ele é único.

Na realidade, a cristalografia tem inúmeras aplicações. Ela influencia as nossas vidas quotidianas e consiste na espinha dorsal de indústrias que dependem cada vez mais da criação e desenvolvimento de novos produtos. Entre as grandes beneficiadas pela cristalografia, temos as indústrias agroalimentar, aeronáutica, automóvel, informática, eletromecânica, farmacêutica, de minas ou de produtos cosméticos. Vejamos outros exemplos concretos.

A **mineralogia** é provavelmente o mais antigo ramo da cristalografia. A cristalografia dos raios-X foi, desde a década de 1920, o principal método de determinar a estrutura atômica de minerais e metais. Grande parte do que sabemos sobre rochas, formações geológicas e a história da Terra é baseada na cristalografia. Até a ela devemos o nosso conhecimento sobre "visitantes espaciais", como meteoritos. Este conhecimento é obviamente essencial na exploração de minas e em qualquer atividade que explore o interior da Terra, como as indústrias de água, petróleo, gás e geotérmicas.

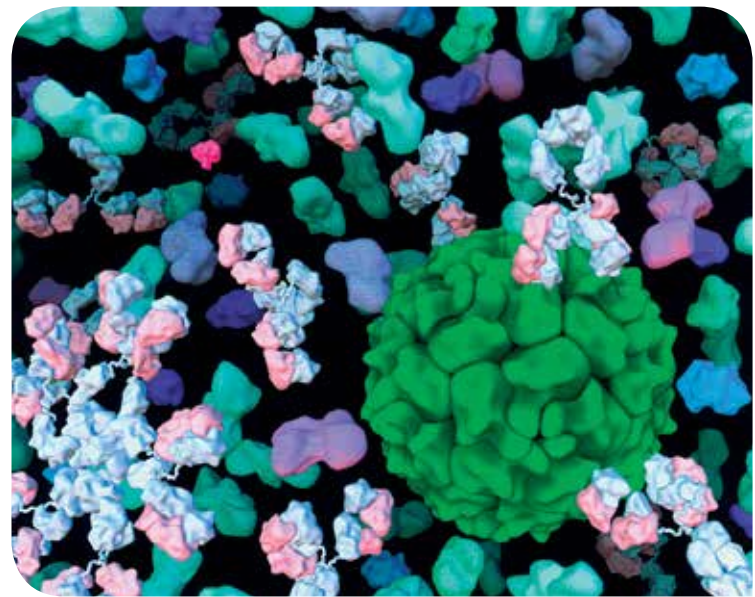
A **conceção de medicamentos** depende fortemente da cristalografia. Quando uma empresa farmacêutica procura um novo medicamento para combater uma bactéria ou um vírus específico, necessita primeiro de encontrar uma pequena molécula capaz de bloquear as proteínas ativas (enzimas) que estão envolvidas no ataque às células humanas. O conhecimento preciso da proteína permite aos cientistas criar compostos farmacêuticos capazes de se fixarem nos postos ativos da substância perigosa e, assim, lhe retirarem a atividade nociva.

A cristalografia é também essencial para distinguir formas sólidas de um medicamento, dado que estes podem ser solúveis em diferentes condições, o que afeta a eficácia do fármaco. Isto é particularmente importante na produção de medicamentos genéricos, nomeadamente na Ásia e em África, onde os anti-HIV são produzidos com uma licença forçada (compulsory licensing) para os tornar acessíveis para os mais pobres.

Novos materiais têm sido usados para desenvolver um tipo de vestuário peculiar. Tecidos inteligentes permitem a entrada de ar ou reter o calor, consoante quem o usa esteja a suar ou a tremer de frio. Roupas interiores podem estar equipadas com sensores para medir a temperatura corporal, a taxa de respiração e a pulsação cardíaca, transmitindo essas informações para o telemóvel do utilizador. Roupas exteriores podem ser elaboradas para detetar certas ameaças, como gases tóxicos, bactérias novas ou calor extremo. Os cristalógrafos podem identificar as propriedades necessárias para desenvolver estes novos materiais.
© Sharee Basinger/
publicdomainpictures.net



Associação de cristais típicos da Mina da Panasqueira (Fundão, Portugal) com quartzo, esfalerite, arsenopirrite e siderite. © Museu de Geologia Fernando Real (UTAD)

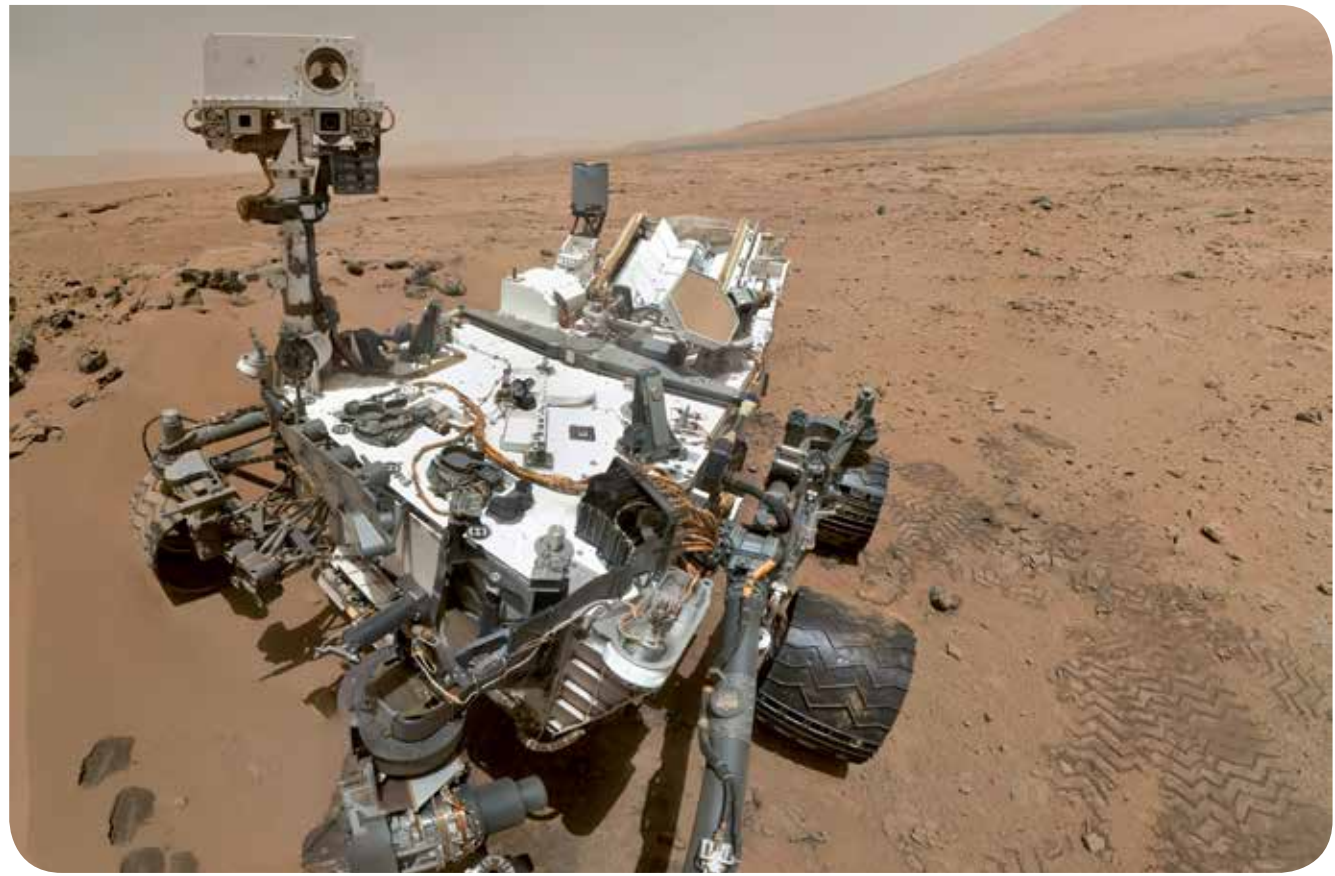


A manteiga de cacau, o ingrediente mais importante do chocolate, cristaliza em seis formas diferentes. Contudo, apenas uma derrete na boca e tem o brilho e a estrutura crocante que o tornam tão saboroso. Esta forma cristalina "apetitosa" não é, todavia, muito estável, pelo que tende a converter-se numa estrutura diferente, muito mais macia, que se derrete lentamente na boca e que deixa a sensação de areia grossa na língua. Felizmente, a conversão é lenta, mas, se o chocolate for guardado durante muito tempo ou a altas temperaturas, pode desenvolver um resíduo branco e transparente que resulta da recristalização. Assim, os produtores de chocolate devem usar um processo sofisticado de cristalização, de forma a obterem a forma cristalina mais desejável, a única aceite pelos apreciadores e consumidores.
 Foto : Wikipedia



Os anticorpos ligam-se a um vírus. A cristalografia é usada para controlar a qualidade dos medicamentos (incluindo antivirais) durante o seu fabrico, de forma a assegurar que as normas de saúde e de segurança são cumpridas. © IUCr

Através do difratômetro equipado pela NASA, o robot Curiosity Rover usou, em Outubro de 2012, cristalografia de raios-X para analisar amostras do solo de Marte. Os resultados obtidos mostraram que estas eram semelhantes aos resistentes solos basálticos dos vulcões do tipo Havaiano. Foto : NASA



Quem organiza o Ano Internacional da Cristalografia?

O Ano Internacional da Cristalografia é organizado conjuntamente pela União Internacional de Cristalografia (IUCr) e pela UNESCO. Será um elo de ligação entre outras duas grandes iniciativas do género, sucedendo ao Ano Internacional da Química (2011) e antecipando o planeado Ano Internacional da Luz (2015). As três comemorações estão integradas no Programa Internacional de Ciências Fundamentais, da responsabilidade da UNESCO.

Porquê agora?

O Ano Internacional da Cristalografia comemora o centenário do nascimento da cristalografia dos raios-X, homenageando o trabalho pioneiro de Max von Laue e William Henry Bragg / William Lawrence Bragg. Em 2014, também se comemora o 50º aniversário de outro Prémio Nobel, atribuído a Dorothy Hodgkin pelo trabalho em torno da vitamina e da penicilina (ver capítulo *Uma breve referência histórica*).

Apesar de a cristalografia ser hoje fundamental a todas as ciências, permanece relativamente desconhecida para o grande público. Um dos objetivos do Ano Internacional da Cristalografia passa por promover a educação e a sensibilização pública através de um conjunto vasto de atividades (ver capítulo *Quem irá beneficiar do Ano Internacional da Cristalografia?*)

Os cristalógrafos estão ativos em mais de 80 países, 53 dos quais são membros da União Internacional de Cristalografia. Esta instituição assegura acesso igualitário a informação e dados a todos os membros e promove a cooperação internacional.

É preciso ampliar o alcance da cristalografia, de forma a aumentar a experiência nesta área dos países em desenvolvimento, contribuindo para a sua evolução industrial e científica. Isto assume particular urgência dado o papel fulcral que a cristalografia irá ter, nas próximas décadas, rumo a um desenvolvimento sustentável.

Países membros da União Internacional de Cristalografia



Desafios para o futuro

No ano 2000, os governos mundiais adotaram os Objetivos de Desenvolvimento do Milénio, promovidos pelas Nações Unidas. Entre estes desafios estavam metas específicas até 2015 para redução da pobreza extrema e da fome, acesso mais amplo a água potável e a serviços de saneamento, redução da mortalidade infantil e reforço da saúde materna.

Os governos estão nesta altura a preparar um conjunto novo de objetivos, que determinarão a agenda do desenvolvimento para o pós-2015. De seguida, apresentam-se alguns exemplos que mostram como a cristalografia pode contribuir para o avanço desta agenda.

Desafios alimentares

A população mundial deve crescer dos 7 mil milhões de habitantes em 2011 até aos 9,1 mil milhões em 2050. A combinação do rápido crescimento da população com uma alimentação mais rica em carne e produtos lácteos deve aumentar a procura nutritiva em 70% até 2050. Isto representa um enorme desafio para a agricultura

As técnicas cristalográficas de ponta são essenciais às investigações no sector agroalimentar.

Por exemplo, a cristalografia pode ser aplicada para analisar solos. Uma das causas graves da deterioração dos solos é a salinização, que pode ocorrer naturalmente ou por ação da atividade humana. Estudos incidentes nas proteínas vegetais podem contribuir para desenvolver culturas mais resistentes aos ambientes salinos.

A cristalografia também pode contribuir para o desenvolvimento de curas para doenças em plantas ou animais. Por exemplo, temos as investigações sobre o cancro em espécies vegetais, como o tomate, ou a produção de vacinas contra as gripes aviária e suína.

Para além disto, os estudos cristalográficos em bactérias são importantes para a produção de derivados alimentares do leite, da carne, dos legumes ou de outras plantas.

Desafios relacionados com a água

Apesar de, recentemente, o Mundo ter imposto, como um dos Objetivos de Desenvolvimento do Milénio, reduzir para metade a proporção de pessoas sem acesso a água potável, a África subsariana e a região árabe estão, de acordo com o *Relatório sobre o Desenvolvimento Mundial da Água* (Nações Unidas, 2012), bem longe dessa meta. Por sua vez, o objetivo equivalente para o saneamento básico não será seguramente cumprido, dado que metade da população das regiões em desenvolvimento continua sem acesso a este serviço essencial. Além disso, o número de pessoas nas cidades sem água potável e saneamento terá aumentado cerca de 20% desde os Objetivos de Desenvolvimento do Milénio, estabelecidos em 2000. Em relação a 2009, com 3,4 mil milhões de pessoas, a população urbana deverá quase duplicar em 2050, com um valor estimado de 6,3 mil milhões de pessoas.

A cristalografia pode ajudar a aumentar a qualidade da água em comunidades pobres. Por exemplo, pode identificar novos materiais capazes de purificar a água durante meses, tais como nano-esponjas (filtros de torneira) ou nano-tablets (purificadores de água). Em simultâneo, pode também contribuir para o desenvolvimento de soluções ecológicas para melhorar o saneamento.

Desafios energéticos

Embora a energia tenha estado ausente dos Objetivos de Desenvolvimento do Milénio, ela deve ser uma área chave da agenda pós-2015. Em Setembro de 2011, o Secretário-Geral das Nações Unidas lançou a iniciativa *Energia Sustentável para Todos*. Surgiu num momento de preocupação crescente com o impacto climático das economias baseadas em energias fósseis e de reconhecimento da necessidade de acelerar a transição para as fontes de energia sustentáveis. De acordo com a Agência de Energia Internacional e apesar da crise financeira global, as emissões de dióxido carbono (CO₂) aumentaram, entre 2008 e 2010, 5% para 30.6 gigatoneladas (Gt). Caso se

Olaria Pedrada de Nisa – os “barros bordados” de Nisa, Alto Alentejo - Portugal, são peças de olaria decoradas com pequenos fragmentos de quartzo que formam motivos decorativos ligados à flora e à fauna da região. A beleza e qualidade final das peças dependem da simetria e coerência do desenho.
 © Digisfera / António Cabral



mantenha o objetivo de que o aquecimento global não supere os 2°C neste século, as emissões de CO₂ não podem superar os 32 Gt em 2020.

No entanto, é de esperar que o consumo de energia global cresça cerca de 50% entre 2007 e 2035, com os não-membros da OCDE a contribuírem 84% para esse aumento. Em 2009, 1,4 mil milhões de seres humanos permaneciam sem acesso a eletricidade. A utilização de energia a partir de fontes renováveis deverá aumentar cerca de 60% até 2035.

A cristalografia consegue desenvolver novos produtos, como materiais isolantes, que reduzem simultaneamente o consumo de energia doméstica e as emissões de carbono (bem como a fatura de aquecimento). Também consegue identificar materiais que reduzem o custo energético de painéis solares, moinhos de vento ou baterias, ao mesmo tempo que os torna mais eficientes. Isso pode contribuir para diminuir o desperdício e aumentar o acesso a tecnologias amigas do ambiente.

Uma indústria química “mais verde”

Tornar a indústria química “mais verde” será fundamental para tornar a economia global igualmente “mais verde”. A indústria química fabrica mais de 70.000 produtos, desde plásticos e fertilizantes até detergentes e medicamentos. Está altamente dependente do petróleo, gastando 10% da respetiva produção global em 80%-90% da atividade industrial. É, portanto, uma grande consumidora de energia e de recursos.

Para além do mais, muitos dissolventes e catalisadores são tóxicos e a eliminação dos resíduos químicos é um processo complexo e caro. Atualmente, substâncias tóxicas e cancerígenas estão a ser lançadas no ar, no solo e na água. De acordo com o Programa Ambiental das Nações Unidas, a Europa Ocidental produziu, em 2000, um total de 42 milhões de toneladas de lixo tóxico, dos quais 5 milhões foram exportados um ano mais tarde

A cristalografia pode colaborar na evolução da construção de materiais ecológicos nos países desenvolvidos e em desenvolvimento. Pode também ajudar a reduzir a poluição, através da substituição de dissolventes químicos por produtos inorgânicos “verdes”, elaborados à base de líquidos iónicos e CO₂. Finalmente, pode também dar o seu contributo na redução da quantidade e dos custos de eliminação dos resíduos minérios, através de métodos que permitem extrair apenas os materiais necessários.

Desafios na área da saúde

Os desafios na área da saúde continuarão a ser tremendos nas próximas décadas. Por exemplo, continua sem haver vacina ou cura para pandemias como o VIH / SIDA, o dengue e a malária, que continuam a devastar principalmente os países em desenvolvimento.

Muitos dos problemas de saúde nos países em desenvolvimento estão ligados à falta de acesso a água potável e a serviços de saneamento. É o que sucede com as doenças diarreicas, como a cólera ou as esquistossomoses crónicas, cujas estimativas apontam para que pelo menos 90% dos casos aconteçam em África.

Contudo, os países em desenvolvimento estão também expostos aos mesmos problemas crónicos que os países desenvolvidos, tais como doenças cardíacas, cancro e, cada vez mais, diabetes (*ver imagem*)

Outras situações graves de saúde que afetam simultaneamente países ricos e pobres incluem o aparecimento de novas patologias e a resistência crescente das bactérias aos tratamentos médicos existentes.

A Cristalografia pode, por exemplo, contrariar a resistência crescente das bactérias aos antibióticos. Juntamente com Venkatraman Ramakrishnan e Thomas Steitz, a cristalógrafa Ada Yonath liderou os trabalhos de determinação da estrutura do ribossoma e de análise à forma como o seu funcionamento é perturbado pelos antibióticos. Os ribossomas são responsáveis pela produção de todas as proteínas nas células vivas, nomeadamente nos humanos, nas plantas e nas bactérias. Se a função do ribossoma é bloqueada, a célula morre. Assim, o conhecimento sobre os ribossomas é fundamental na produção de antibióticos, para que estes sejam capazes de atacar a atividade das bactérias nocivas sem perturbar a atividade dos ribossomas humanos. Em 2008, este trabalho valeu à Professora Ada Yonath o Prémio L'Oréal-UNESCO para as Mulheres na Ciência e, um ano mais tarde, os três investigadores receberam o Prémio Nobel.

As zonas tropicais têm uma particular e muito rica biodiversidade que permanece pouco explorada. A cristalografia pode ajudar os países a identificar as propriedades e o comportamento de plantas endógenas, contribuindo para o desenvolvimento de produtos de saúde e de beleza, remédios naturais, etc.

Quem irá beneficiar do Ano Internacional da Cristalografia?

O Ano Internacional terá como alvo os Governos...

Interagindo com eles e recomendando a execução de políticas que:

- ❖ financiem a criação e o funcionamento de, pelo menos, um centro nacional cristalográfico por país;
- ❖ desenvolvam cooperação com os centros cristalográficos estrangeiros, bem como com os sincrotrões e outras grandes instalações científicas;
- ❖ incentivem a aplicação da cristalografia na investigação e no desenvolvimento;
- ❖ promovam a investigação cristalográfica;
- ❖ introduzam a cristalografia nos programas escolares e universitários ou modernizem os já existentes.

Para além disto, uma série de cimeiras regionais estão planeadas para destacar as dificuldades na realização de investigação de ponta em certas partes do mundo e identificar formas de as ultrapassar. Estas reuniões irão juntar países com diferentes línguas, etnias, religiões ou sistemas políticos, delineando o impacto futuro da cristalografia na ciência, na tecnologia e no desenvolvimento industrial e identificando oportunidades de emprego nesta área.

O Ano Internacional terá como alvo escolas e universidades...

Para introduzir o ensino da cristalografia onde ele ainda não existe, através de:

- ❖ laboratórios abertos preparados pela União Internacional de Cristalografia, mostrando, em países da Ásia, da África e da América Latina, o funcionamento de difratómetros, através de parcerias com fabricantes destes aparelhos;
- ❖ reforço e extensão, às zonas mais deficitárias da Ásia e da América Latina, de uma iniciativa atual, que pretende implementar o ensino da cristalografia nas universidades africanas;
- ❖ demonstrações e competições em escolas básicas e secundárias;
- ❖ projetos destinados a estudantes, consistindo na resolução de problemas através de conhecimentos de cristalografia, física e química;
- ❖ uma exposição itinerante sobre cristalografia e arte geométrica, destinada às escolas e universidades do mundo árabe-islâmico e organizada pela Associação Marroquina de Cristalografia (ver caixa). Através de um difratómetro portátil, a exposição fará também demonstrações de cristalização e mostrará alguns efeitos visuais da aplicação dos raios-X.

Nos últimos 20 anos, o número de pessoas com diabetes passou de 30 para 230 milhões em todo o mundo, de acordo com a Federação Internacional de Diabetes. Sete dos dez países com mais diabetes são países em desenvolvimento ou economias emergentes, como a China ou a Índia. Nas Caraíbas e no Médio Oriente, cerca de 20% dos adultos sofrem de diabetes. Se a estrutura da insulina natural, produzida pelo pâncreas, não tivesse sido determinada pela cristalografia dos raios-X, seria impossível fabricar hoje a insulina humana biossintética, um verdadeiro medicamento salva-vidas.

Foto : Wikipédia





Cristal da proteína RFD2 isolada a partir de *Acidanus ambivalens* (Archea), eleito pela "Acta Crystallographica" como melhor cristal de proteína 2013. © M. Freitas (iBET), T. Bandeiras (iBET) e C. Frazão (ITQB)

O Ano Internacional terá como alvo o grande público...

Para aumentar a consciência do papel fundamental da cristalografia em muitos dos desenvolvimentos tecnológicos da sociedade moderna, na herança cultural e na história de arte, através de:

- * conferências públicas organizadas por membros da União Internacional de Cristalografia. Entre os temas, estarão a importância fulcral da estrutura cristalina das proteínas na conceção de medicamentos, a cristalografia e a simetria artística ou a análise cristalográfica de artefactos e materiais antigos;
- * existência de cartazes publicitários que salientem a importância e as maravilhas da cristalografia;
- * publicação, na imprensa, televisão e outros meios de comunicação, de conteúdos noticiosos sobre os contributos da cristalografia na economia global.

DESENVOLVIMENTO DA CRISTALOGRAFIA EM UNIVERSIDADES AFRICANAS



©Serah Kimani

Um dos principais objetivos da União Internacional de Cristalografia consiste em dar formação em ensino e métodos de investigação em Cristalografia a professores universitários e doutorandos de países em desenvolvimento.

Em colaboração com universidades da África do Sul e com a Associação Sul-Africana de Cristalografia, a União Internacional organizou, durante a última dezena de anos, alguns cursos sobre esta área em países africanos de língua inglesa. Esta parceria concedeu também uma bolsa a dois extraordinários estudantes de doutoramento quenianos, Serah Kimani e Ndoria Thuku, permitindo-lhes finalizar as suas teses na África do Sul. A tese de Kimani envolveu a descoberta de, pelo menos, 40 estruturas cristalinas, tendo depois, em 2012, assumido um cargo na Universidade de Cidade do Cabo. Por sua vez, Thuku determinou a estrutura cristalina da *Rhodococcus rhodochrous*, uma bactéria usada na agricultura e na horticultura para melhorar a saúde das plantas. Desde que se graduou em 2012, o Doutor Thuku é um investigador de pós-doutoramento do Departamento de Medicina e Bioquímica da mesma universidade.

Em 2011, a União Internacional de Cristalografia elaborou um programa ambicioso para os países da África subsariana. Designado por *Iniciativa para a Cristalografia em África*, este projeto tinha como objetivo não só formar professores universitários e doutorandos, mas também equipar as universidades com difratómetros, com um valor individual entre os 80.000 e os 150.000 euros, de forma a permitir-lhes realizar investigação com qualidade. Um parceiro chave neste processo foi a Bruker France, uma empresa privada que aceitou suportar, para todas as universidades selecionadas pela União Internacional, os custos da aquisição de difratómetros em boas condições de utilização. Por sua vez, a IUCr suportou os custos da entrega do material nos vários estabelecimentos de ensino. Finalmente, as universidades ficaram responsáveis pela manutenção dos difratómetros e por pagar os equipamentos complementares, tais como computadores ou tubos de raios-X.

O Ano Internacional tem como alvo a comunidade científica...

Para reforçar a colaboração entre cientistas de todo o mundo, com ênfase na parceria Norte-Sul, através de:

- ❖ lançamento de uma publicação de livre acesso sobre cristalografia (na imagem), com o título de *IUCrJ*;
- ❖ projetos de cooperação científica envolvendo grandes sincrotrões em países desenvolvidos e em desenvolvimento, tais como uma instalação no Brasil ou a SESAME (Médio Oriente), que nasceu de um projeto da UNESCO (ver página 14);
- ❖ consultas para identificar a melhor forma de conservar todos os dados de difração recolhidos em instalações de grande escala e em laboratórios cristalográficos.



Capa do primeiro número da nova publicação de livre acesso, disponível em: www.iucrj.org

Através deste programa, a instituição pioneira na aprendizagem do funcionamento destes aparelhos foi a Universidade de Dschang (Camarões). Os professores universitários e os estudantes de doutoramento tiveram, em Fevereiro de 2012, um curso intensivo de 20 horas, antecipando a chegada do difratómetro no ano seguinte.

A Associação Camaronesa de Cristalografia foi fundada nessa altura. A jovem estrutura realizou o primeiro curso entre 7 e 13 de Abril de 2013, em Dschang. O foco da aprendizagem esteve no uso do difratómetro na determinação de estruturas cristalinas, tendo atraído 24 professores e doutorandos de universidades dos Camarões e da sub-região envolvente. Foi cofinanciada pela União Internacional de Cristalografia, pela Associação Camaronesa de Cristalografia, pela Universidade de Dschang e pela Bruker France.

Os próximos países a beneficiarem desta iniciativa serão o Burkina Faso, a Costa do Marfim, o Gabão e o Senegal. Em cada país, será selecionada uma universidade, que terá depois a missão de formar *staff* em outros estabelecimentos de ensino e de constituir o centro nacional cristalográfico. Estes centros terão livre acesso a todas as publicações especializadas da União Internacional de Cristalografia.

A União Internacional de Cristalografia está atualmente a contactar outros eventuais patrocinadores, de forma a ampliar esta iniciativa a todo o continente africano.

A União Internacional da Cristalografia deverá também alargar este programa aos países em desenvolvimento da Ásia e da América Latina.

Para mais detalhes:
claudelcomte@crm2.uhp-nancy.fr



Prof. Claude Lecomte, Vice-Presidente da IUCr, no ensino de um curso de cristalografia na Universidade de Dschang (Camarões), em Fevereiro de 2012. © Patrice Kenfack/Association camerounaise de cristallographie

A SIMETRIA NA ARTE E NA ARQUITETURA

Seja numa face humana, numa flor, num peixe, numa borboleta – ou num objeto não-vivo, como uma concha – a simetria atravessa todo o mundo natural. Este facto provocou sempre fascínio nas civilizações humanas, que, desde há milhares de anos, transpuseram a simetria para a arte e para a arquitetura.

A simetria pode ser encontrada em várias expressões de criatividade humana: carpetes e tapetes, cerâmica, desenhos, pintura, poesia, escultura, arquitetura, caligrafia, etc. Por exemplo, há simetria no alfabeto chinês. A propósito, a presença da simetria na arte e arquitetura chinesas reflete a sua própria filosofia cultural de busca da harmonia através do equilíbrio.

A arte e a arquitetura podem apresentar diferentes tipos de simetria. Um motivo que se repete indefinidamente tem uma simetria de translação. Pode ser apenas numa dimensão, como o friso abaixo, ou a duas dimensões, como os animais voadores das imagens de Escher.

Na simetria bilateral, as partes direita e esquerda são as imagens refletidas uma da outra. Um exemplo observado na natureza acontece nas borboletas. A simetria bilateral foi sempre uma característica comum na arquitetura. Eis alguns exemplos históricos: o **Taj Mahal** (Índia, ver imagem), a Cidade Proibida (China) ou o templo maia de **Chichén Itzá** (México, ver imagem). A simetria bilateral também é frequente no domínio artístico, embora a simetria perfeita na pintura seja rara.

Se, mantendo a forma exatamente igual, uma figura pode ser rodada em torno de um eixo ou de um ponto, então ela apresenta uma simetria de rotação. Por exemplo, as pirâmides de Gizé (Egipto) apresentam uma simetria de rotação de ordem 4 (incluindo a base). Por sua vez, o interior da cúpula da **Mesquita de Lotfollah** (Irão, ver imagem) apresenta, em torno do centro da figura, uma simetria de rotação de ordem 32.

Os padrões geométricos foram presença constante na arte de muitas civilizações. Alguns exemplos podem ser encontrados nas pinturas de areia dos índios Navajo (América do Norte), no **kolam** (Sul da Índia, ver imagem), no batik indonésio (técnica de tingimento), na arte dos aborígenes australianos ou no mandala tibetano.

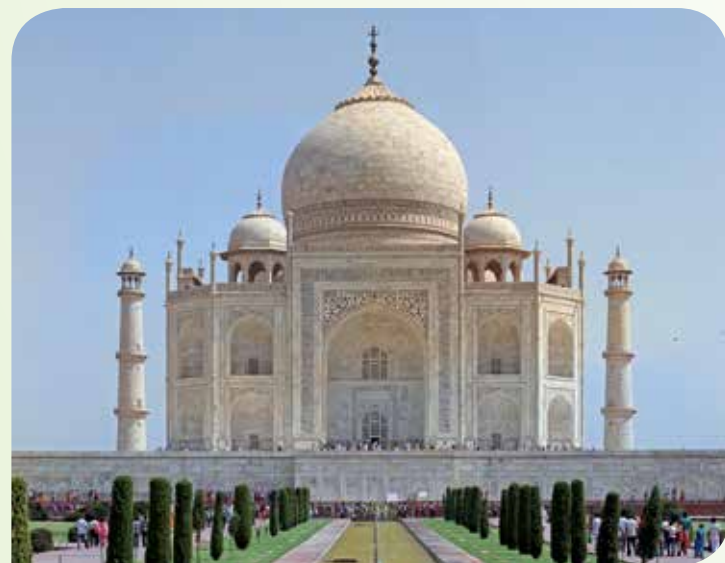


*Cabeça de bronze em arte yoruba, Ife (Nigéria), século XII
Foto : Wikipedia*



Carrocel / Calçada Portuguesa (Vila do Conde) © José Pedro Martins

*Motivo bidimensional de Maurits Cornelis Escher (Holanda)
© M C Escher Foundation*



*Taj Mahal, Índia, concluído em 1648, Património Mundial da UNESCO
Foto : Muhammad Mahdi Karim/Wikipedia*



Templo maia de Chichén Itzá, México, construído entre os séculos VII e IX, Património Mundial da UNESCO. © S. Schneegans/UNESCO

Desde cerca do século VII que as civilizações islâmicas usam padrões geométricos em mosaicos e outras formas artísticas, de forma a combinarem visualmente a espiritualidade com a ciência e a arte. A arte islâmica poderá ter influenciado o movimento de abstração geométrica, surgido, no século XX, no mundo ocidental. Dois dos proponentes desta corrente artística foram **Maurits Cornelis Escher** e **Bridget Riley** (ver imagem). Escher terá sido aparentemente inspirado por uma visita ao palácio mouro de Alhambra, em Espanha.

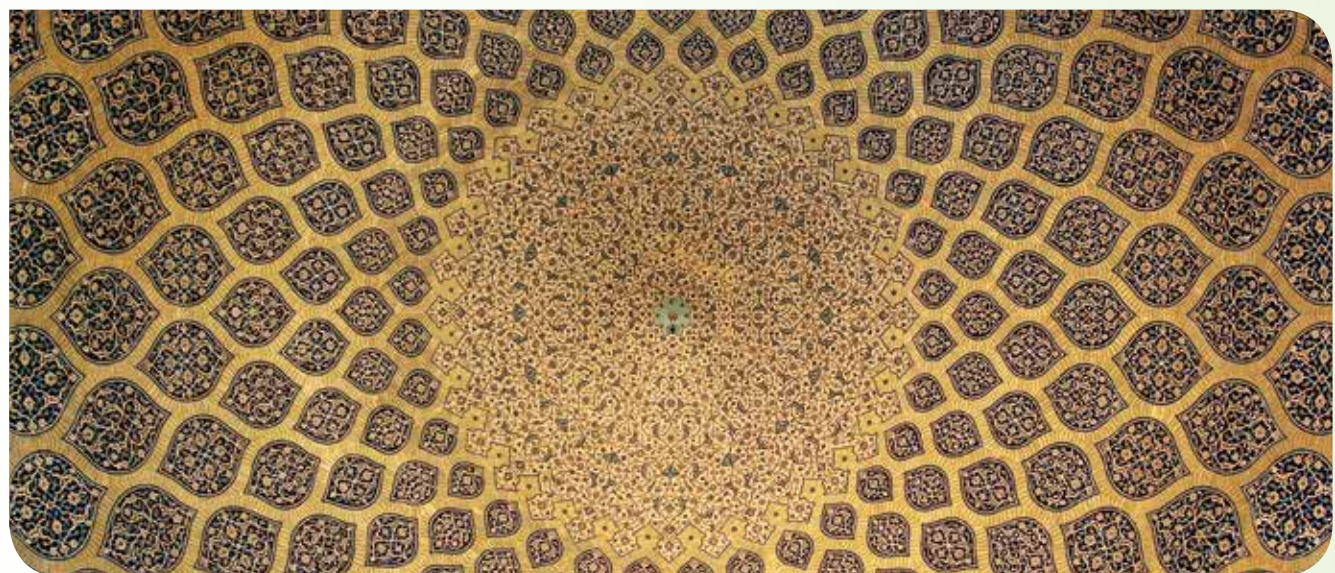
Ao longo de 2014, a Associação Marroquina de Cristalografia está a organizar uma exposição itinerante sobre cristalografia e arte geométrica no mundo Árabe-Islâmico.

Para mais detalhes:
 Abdelmalek Thalal – abdtthalal@gmail.com

Teto em forma de cúpula da Mesquita de Lotfollah, Irão, concluída em 1618, Património Mundial da UNESCO
 Foto : Phillip Maiwald/Wikipedia



Kolams como este, em Tamil Nadu, são desenhados com farinha de arroz ou giz à frente das casas do Sul da Índia, de forma a atraírem prosperidade. Estes motivos chegam a ser renovados diariamente.
 Foto : Wikipedia



Al-Attarine Madrasa (escola), em Fez (Marrocos), Património Mundial da UNESCO. Foi construído pelo sultão merínida Uthman II Abu Said, em 1323-1325.
 © A. Thalal



Shadow Play, de Briget Riley, Reino Unido, 1990.
 Photo: Wikipedia

Friso unidimensional
 © Associação Marroquina de Cristalografia



Como pode o meu país reforçar a cristalografia em 2014 e no futuro?

Qualquer país interessado em apostar numa indústria baseada no conhecimento científico ou em aumentar o valor dos seus produtos deve ter uma forte capacidade interna ao nível da investigação cristalográfica. Durante o Ano Internacional da Cristalografia, espera-se que países em desenvolvimento em África, na América Latina, nas Caraíbas, na região árabe e noutras áreas asiáticas tenham uma grande evolução nesta área.

Métodos para melhorar a formação e a investigação

Como vimos, a cristalografia é uma ciência interdisciplinar, percorrendo a física, a química, a engenharia dos materiais, a geologia, a biologia, as ciências farmacêuticas e a medicina. Cientistas com experiência em alguma destas áreas são potenciais cristalógrafos. Durante 2014, a União Internacional de Cristalografia vai encorajar mais países a tornarem-se membros, de modo a promover a cooperação internacional em formação e investigação, bem como no acesso a informação e conhecimento.

Para poderem aplicar os conhecimentos adquiridos, os novos cristalógrafos precisam, após a formação, de infraestruturas apropriadas. A UNESCO e a União Internacional de Cristalografia recomendam que os governos criem, pelo menos, um centro nacional cristalográfico equipado com um difratómetro e que seja financeiramente sustentável. Após ser efetuada a análise da estrutura de um cristal pelo difratómetro, o centro cristalográfico deve depois modelá-lo através de *software* próprio. Como parceiros do Ano Internacional, os fabricantes dos difratómetros garantem um preço acessível na aquisição destes instrumentos e asseguram formação sobre a manutenção dos aparelhos.

O muro de protecção na sala experimental do sincrotrão de luz do Médio Oriente, o SESAME, um centro intergovernamental situado na Jordânia. Criado sob a égide da UNESCO, reúne o Bahrein, o Chipre, o Egipto, o Irão, Israel, a Jordânia, o Paquistão, a Autoridade Palestiniana e a Turquia, bem como 13 estados observadores, entre os quais o Japão e os Estados Unidos. O SESAME foi completado em 2008 e o laboratório deverá estar totalmente operacional em 2016.

© SESAME



É também importante que os governos ponham em prática políticas que facilitem a ligação dos centros cristalográficos com universidades e indústrias nacionais e com outros centros espalhados pelo mundo. O objetivo global é impulsionar o desenvolvimento sustentável com base no conhecimento científico.

Os governos devem também promover relações entre os centros cristalográficos nacionais e os diversos sincrotrões mundiais, como o SESAME, na Jordânia (*ver imagem*).

De forma a partilhar os desenvolvimentos científicos e tecnológicos em cristalografia e dar mais visibilidade às publicações de cristalógrafos, nomeadamente dos países em desenvolvimento, a União Internacional da Cristalografia está a lançar uma publicação de livre acesso, o *IUCrJ* (*ver imagem na página 11*).

A UNESCO e a União Internacional de Cristalografia estão também a estimular os governos a desenvolverem centros regionais ou sub-regionais, proporcionando formação e experiência em cristalografia, de forma a otimizar os recursos em termos institucionais.

Formação dos cristalógrafos do futuro

Esta é a altura ideal para os países formarem um número importante de cristalógrafos. Os governos podem tomar medidas para modernizar os currículos escolares e universitários, promovendo um contacto mais forte com a cristalografia nos percursos académicos de física, química, biologia e geologia. A UNESCO e a União Internacional de Cristalografia estão à disposição dos governos para fornecerem orientações sobre o desenvolvimento curricular.

Os governos estão também convidados a manifestarem interesse em acolherem alguns laboratórios abertos de cristalografia, criados especialmente para os jovens.

A União Internacional de Cristalografia também idealizou um conjunto de projetos e competições escolares, com base na resolução de problemas envolvendo conhecimentos de cristalografia, física ou química. O objetivo principal é mostrar as aplicações destas ciências no progresso da agricultura, na conceção de medicamentos, na criação de materiais amigos do ambiente, etc. Os países estão convidados a organizarem estas competições a nível nacional.



Participar no Ano Internacional da Cristalografia

Os 195 Estados membros da UNESCO estão convidados a contactar a equipa da UNESCO integrada no Programa Internacional de Ciências Fundamentais (IBSP) ou a União Internacional de Cristalografia, de forma a elaborarem um programa nacional de atividades enquadrado no Ano Internacional da Cristalografia.

União Internacional de Cristalografia

Prof. Gautam Desiraju, Presidente
gautam_desiraju@yahoo.com

Prof. Claude Lecomte,
Vice-Presidente
claude.lecomte@crm2.uhp-nancy.fr

Doutor Michele Zema,
Director do Projeto do Ano
Internacional da Cristalografia
mz@iucr.org

UNESCO

Prof. Maciej Nalecz, Diretor,
Secretário-Executivo do IBSP
m.nalecz@unesco.org

Doutor Jean-Paul Ngome Abiaga,
Especialista-Adjunto do Programa
jj.ngome-abiaga@unesco.org

Doutor Ahmed Fahmi,
Especialista do Programa
a.fahmi@unesco.org

Comité Português para o Programa Internacional de Geociências (IGCP-UNESCO)

Comissão Nacional da UNESCO
Largo das Necessidades
1350-215 Lisboa
Portugal
(+351) 213 946 652
aicr@utad.pt
http://www.igcp.org.pt/IGCP_Pt/Inicio.html
<http://www.unescoportugal.mne.pt>
<http://www.mat.uc.pt/mpt2013/>
<http://www.aicr.utad.pt>



A cristalografia ajuda a determinar a combinação ideal de alumínio e de magnésio nas ligas utilizadas no fabrico de aviões. Com efeito, demasiado alumínio tornará o avião muito pesado, e com demasiado magnésio tornar-se-á mais inflamável.

© Shutterstock/IM_photo

O programa do Ano Internacional da Cristalografia e alguns recursos pedagógicos estão disponíveis no site oficial:

www.iycr2014.org

Para encontrar mais informações sobre o Ano Internacional da Cristalografia 2014, não deixe de contactar:

União Internacional de Cristalografia

Prof. Gautam Desiraju, Presidente
gautam_desiraju@yahoo.com

Prof. Claude Lecomte,
Vice-Presidente
claude.lecomte@crm2.uhp-nancy.fr

Doutor Michele Zema,
Director do Projeto do Ano
Internacional da Cristalografia
mz@iucr.org

UNESCO

Prof. Maciej Nalecz, Diretor,
Secretário-Executivo do IBSP
m.nalecz@unesco.org

Doutor Jean-Paul Ngome Abiaga,
Especialista-Adjunto do Programa
jj.ngome-abiaga@unesco.org

Doutor Ahmed Fahmi,
Especialista do Programa
a.fahmi@unesco.org

Comité Português para o Programa Internacional de Geociências (IGCP-UNESCO)

Comissão Nacional da UNESCO
Largo das Necessidades
1350-215 Lisboa
Portugal
(+351) 213 946 652
aicr@utad.pt
http://www.igcp.org.pt/IGCP_Pt/Inicio.html
<http://www.unescoportugal.mne.pt>
<http://www.mat.uc.pt/mpt2013/>
<http://www.aicr.utad.pt>

www.iycr2014.org

