

Estrutura e Reactividade Molecular, S. J. Formosinho e A. J. C. Varandas, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1986, 175+viii págs.

Temos grande dificuldade com a quantificação de moléculas poliatómicas em cálculos do espectro infra-vermelho (da água, por exemplo). Temos o método de aproximação apropriado, mas os cálculos são muito complicados. Isto foi escrito em 1922 por Max Born, em carta dirigida a Einstein e refere trabalho com o seu assistente de então, Hückel. 65 anos mais tarde, a mesma afirmação é ainda válida! Certamente num quadro diferente. Passou já o ano de 1925 e a descoberta da Mecânica Quântica nas duas formalizações independentes (de Heisenberg e de Schrödinger); temos hoje acesso a máquinas de cálculo já muito potentes mas ainda em rápida evolução que cada ano nos põe à disposição uma maior capacidade a um custo mais baixo. Mesmo assim, é ainda verdade que os cálculos exigidos para uma boa previsão de propriedades moleculares são *muito complicados* (na presunção geral de que *temos a teoria apropriada*), quer pelo tempo de cálculo que consomem e pela capacidade do computador exigido, quer pela dificuldade de interpretação dos resultados obtidos. E é nestes aspectos que o ensaio agora publicado pelos Professores Sebastião Formosinho e António Varandas se torna particularmente relevante para a aprendizagem da Química na sua aplicação a estudos de estrutura e reactividade moleculares, com uma máxima economia de trabalho formal.

Na primeira parte (42 páginas), é feita uma apresentação sucinta da Mecânica Quântica de Schrödinger e da sua aplicação ao problema de uma partícula livre numa caixa de potencial. Nas 74 páginas que constituem a parte II, são apresentados alguns dos problemas fundamentais da Estrutura Electrónica e Molecular numa abordagem baseada na experiência anterior com o comportamento da partícula livre na caixa de potencial. Dos temas tratados poderemos salientar os movimentos moleculares (translação, rotação, vibração), a estrutura e espectroscopia electrónica de átomos, o conceito de ligação química e algumas propriedades moleculares incluindo aspectos de espectroscopia electrónica. Nas 43 páginas da parte III, são introduzidos alguns problemas de Reactividade Química com uma notável economia e precisão de linguagem que denotam bem a profunda compreensão que os autores têm deles.

Com uma apresentação muito original, **ESTRUTURA E REACTIVIDADE MOLECULAR** é um livro que será muito útil como fonte de informação e como meio de melhorar a compreensão dum con-

junto de importantes temas de Química. Pode assim recomendar-se o seu estudo, quer para alunos de licenciatura quer para licenciados. Com uma redacção muito cuidada e um bom aspecto gráfico, a sua leitura será agradável e marcante para a formação científica do leitor.

J. A. N. F. GOMES

Curso de Programação Fortran, Rui Alberto Lopes Feio, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1986, 191 p.

Um livro útil este, incluído na colecção «Manuais Universitários» da F. Gulbenkian e que sistematiza as principais noções de FORTRAN (versões 4 e 77) inevitavelmente essenciais num curso inicial (ou na parte de aquisição de linguagem de uma disciplina do tipo «Física Computacional»). O presente volume pode servir de suporte a um tal curso, pois está escrito de forma acessível e com adequadas progressão expositiva, escolha e localização de exemplos. Estes constituem também um exercício (coerente) dos próprios preceitos de boa programação (amplos comentários, bom arranjo gráfico) com que o autor remata.

Um certo número destes exemplos dirigem-se, aliás, a tópicos de básica utilidade em Física Numérica podendo servir de embrião a um banco de algoritmos. O capítulo sobre a versão 77 apresenta uma clara vantagem sobre a leitura do fundamental (mas fastidioso) «Programming in Standard F-77» de Balfour e Hanwick.

Recentes obras na área atribuem importância decisiva ao desenvolvimento rápido nos alunos de fluência algorítmica, sempre num contexto físico específico (vejam-se «Microcomputers in Quantum Mechanics» (1983) de Killinbeck e «Computational Physics» (1985) de S. Kowin, ambos num BASIC de fácil reformulação).

Por outro lado, o FORTRAN é hoje a linguagem de produção científica competitiva em Física, de um modo supremo em áreas como as que D. Hermann («Computer Simulation Methods», a sair) ou Kalos e Whitlock («The Basics of Monte-Carlo Method», 1987) revêem e sintetizam a partir de uma ampla base manipulável de algoritmos. A preparação de estudantes eventualmente activos em áreas de ponta, tem assim sempre a ganhar com um manual de rápido acesso. Para além do que ficou dito sobre a sintonia dos exemplos com a literatura mais recente, o papel secundário dos fluxogramas e o detalhe de instruções de entrada/saída e controlo (na versão 77) são características bem vindas para o instrutor de Física face a alternativas prefixas e dispersas e sem serviço de apoio a utentes. Pouco mais lhe faltará do que detalhar o uso de variáveis de dupla precisão

(particularmente em aritmética mista) e repor na lista de funções intrínsecas os geradores pseudo-alteatórios (RANF e RANSET) e o posicionador lógico SHIFT (preparando para grandes usos de memória paralelos ao caso paradigmático de «multysin-coding» em Física Estatística).

JOSÉ SILVA DUARTE

Bird of Passage, Rudolf Ernst Peierls, Princeton, University Press, 1985, 350 p.

R. E. Peierls é um dos nomes mais eminentes da física teórica do séc. XX. Nascido em Berlim (1907), foi aluno de Planck, Nernst, Sommerfeld, etc. e, posteriormente, iniciou-se na investigação com Heisenberg, Pauli, Dirac, Bohr, tendo como companheiros (de trabalho e lazer) Bethe, Landau, Weisskopf e muitos outros físicos de primeira grandeza. Envolvido na grande aventura científica que foi o nascimento e desenvolvimento da Mecânica Quântica, apanhado pelas tempestades económicas e sociais que fustigaram a Europa nos anos 30 e 40, Peierls viu-se obrigado a viver em permanente mudança, qual autêntica ave de passagem. Neste seu livro de memórias (que não é literatura, como logo de início o «exigira» sua mulher, a não menos conhecida Genia Peierls, de origem russa e companheira do autor nas suas deambulações), as personagens e situações são descritas em pequenas histórias, plenas de humor e cheias de sabedoria. Através delas, somos levados a um conhecimento mais íntimo de grandes personalidades científicas deste século; mas também percebemos melhor a génese de processos históricos que viriam a marcar o pós-guerra (o memorando Peierls-Frish e o início da investigação nuclear aplicada em Inglaterra; o projecto Manhattan e a 1.^a bomba atómica; o caso Fuchs e os «segredos de estado»; o movimento Pugwash e a luta pela paz mundial).

Peierls leva-nos a ver, por dentro, a criação do departamento de Física Teórica em Birmingham e, mais tarde, em Oxford, onde nos são mostradas as peculiares relações entre a Universidade e os Colégios. Através de histórias pitorescas, revela-nos o seu interesse atento e carinhoso pelos inúmeros colaboradores e alunos. Para quem o conheceu, jamais se poderá esquecer da sua figura simples e modesta, onde, no entanto, se esconde uma enorme generosidade, uma absoluta honestidade e seriedade intelectuais, um grande professor e cientista. Facilmente o podemos imaginar a contar, com sorriso prazenteiro, como Pauli, perante o pedido de uma colega para abrandar pois não conseguia acompanhar o seu raciocínio, lhe respondeu: «não me importo se pensa devagar, mas já objecto quando publica mais depressa do que consegue pensar».

Um livro cuja leitura se recomenda vivamente.

E. J. S. LAGE

Terminologia, Símbolos e Unidades para Grandezas Físico-Químicas. Sistema Internacional de Unidades, M. Estela Jardim, Mariana Pereira, Escolar Editora, 1985, 94 p.

O presente livro apresenta o sistema internacional de unidades; um capítulo introdutório informa sobre os aspectos gerais do S.I.; é seguido de um capítulo onde as várias grandezas físicas são apresentadas de forma sistemática, agrupadas pelos ramos tradicionais da física. O terceiro capítulo reúne algumas observações sobre unidades, bem como tabelas de constantes e de conversão de unidades. Finalmente o último capítulo dedica-se às convenções sobre escrita de fórmulas e equações químicas, bem como normas de apresentação de tabelas e gráficos. Trata-se de um trabalho bastante completo e que poderá dar informações úteis não só a professores como a outros profissionais.

Há uma certa rigidez de terminologia que pode ser discutível, dado ainda não existirem regras uniformizadoras em língua portuguesa.

No entanto, e à parte algumas falhas de menor importância como troca de símbolos em tabelas (p. e. $\eta(\mu)$ para velocidade de ondas electromagnéticas), é bastante grave que a tabela de conversão de unidades apresente alguns factores trocados pelo seu inverso (caso, por exemplo, de cm a A, cal a J), a par de outros correctos (p. ex. dine a N). Julgamos que este erro exige uma pronta correcção, pois não é aceitável num trabalho desta índole.

MARIA ESTELA PEREIRA

7.^a Conferência Geral da Sociedade Europeia de Física

Helsínquia, 10-14 Agosto 1987

Sessões Plenárias: *The Evidence for a Black Hole in our Galaxy; Big Bang and Little Bang. Cosmology in the Laboratory; Halley's Comet, a Close Look; Alignment, Polarization and Orientation in Electron-Ion Collisions; Supercomputers in Physics; New Architecture for Digital Optical Computers; Study of Liquid Surfaces by Synchrotron Radiation; Quasi-Crystals; Quantum Gravity; Accelerators for the Future; New Experiments on the Quantum Theory of Light; JET and the Prospect of Nuclear Fusion; Chaos in Lasers; A New Look on Physics Education.*

Simpósios.

Young Physicists Fund: *Existem boas perspectivas de apoio financeiro para um pequeno número de jovens físicos portugueses.*