

A Genealogia Acadêmica.

Perceber as Origens e Influências do Trabalho Científico no Percurso Acadêmico

>
Carlos A. Nieto de Castro

Academic Genealogy. Understanding the Origins and Influences of Scientific Work in the Academic Career. Chemistry is by far the central science in the current world. Its concepts, theories, models and experiments evolved along more than 300 years, since its separation from Natural Philosophy and the understanding of the concept of molecule. No scientist works on his own, divorced from an enormous scientific knowledge developed by his ancestors or precursors. Understanding the roots and collaborations of each scientist along his/her life, associated to the original contribution in each field, paves the way for a richer and objective history of science and technology. This paper is a first attempt to recommend an illustrating and objective methodology for all chemists (but not restricted to) to better understand their own work, the origins and influences of previous and contemporaneous colleagues, by developing their own genealogic academic tree and, following Sir Isaac Newton writing in 1675 “(...) if I have seen further, it is by standing on the shoulders of giants (...), and discovering their own giants”.

A Química é de longe a ciência central no mundo atual. Os seus conceitos, teorias, modelos e experiências evoluíram ao longo de mais de 300 anos, desde a sua separação da Filosofia Natural e da compreensão do conceito de molécula. Nenhum cientista trabalha por conta própria, divorciado do enorme conhecimento científico desenvolvido por seus antecedentes ou precursores. Compreender as raízes e colaborações de cada cientista ao longo da sua vida, associado à contribuição original em cada campo, abre caminho para uma história mais rica e objetiva da ciência e da tecnologia. Este artigo é uma primeira tentativa de recomendar uma metodologia ilustradora e objetiva para todos os químicos (mas não restrita a) entenderem melhor o seu próprio trabalho, as origens e influências de colegas anteriores e contemporâneos, desenvolvendo a sua própria árvore genealógica acadêmica e, seguindo Sir Isaac Newton em 1675 “(...) se eu vi mais longe, é por estar sobre os ombros de gigantes (...)”, descobrindo os seus próprios gigantes”.

“

**Não basta fazer ou fazer bem!
É preciso saber fazer bem e com rigor!**

1. Introdução

Há sempre um momento para uma despedida, e em abril de 2019 jubilei. Dei uma lição final, retrospectiva de toda a minha carreira iniciada no Instituto Superior Técnico, a minha escola de formação, continuada na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, a minha escola de desenvolvimento e transmissão. Na preparação dessa aula, e em discussão com alguns dos meus colaboradores, surgiu a ideia de desenhar/

escrever a árvore genealógica do meu trabalho científico, iniciada com um primeiro trabalho publicado em 2017 [1], sobre 20 anos de investigação das propriedades de fluidos a altas temperaturas no nosso grupo do Centro de Ciências Moleculares e Materiais (1994–2014) e no Centro de Química Estrutural (2015–2017). Entusiasmados pelos resultados iniciais, resolvemos aprofundar o assunto, tendo apresentado a primeira árvore genealógica científica a 10 de maio de 2019 [2]. Seguimos a recomendação mais científica, para uma genealogia profissional, que traça a linha intelectual do descendente através de um ou mais orientadores do seu doutoramento (ou mentor para o seu grau académico não honorífico mais elevado) [3]. Dada a centralidade da minha investigação e docência na área da Química-Física/Termodinâmica/Engenharia Química, foi escolhido o ramo da Química, embora se possa tocar noutras disciplinas, neste caso a Física, área de muitos dos meus percursores. Identificadas as raízes, seguiram-se os descendentes científicos e as colaborações, metodologia idêntica para a análise do legado científico. Para cada cientista identificado nas raízes, faz-se uma pequena descrição da sua área de trabalho, comentando-se seguidamente a possível influência no percurso intelectual do cientista.

2. A génese de um cientista, com uma grande costela de engenheiro

2.1. O Liceu Camões e o Clube de Física e Química (1964/65 e 1965/66)

Foi no período entre 1959 e 1966 que fui aluno do Liceu Camões e onde dei os primeiros passos à descoberta da Física, da Química e da Química-Física, pela mão de uma das professoras mais extraordinárias que tive, a Dr.^a Mariana Teles Antunes Pais Dias Fernandes (Licenciada em Ciências Físico-Químicas, em 1958, na FCUL, e hoje com 84 anos), diretora do Laboratório de Química, professora do 6.º e 7.º A (atuais 10.º e 11.º anos) e que, com o Dr. José Augusto Teixeira, fundou o Clube de Física e Química do Liceu Camões (Figuras 1a e 1b), o primeiro clube científico de Portugal (1965), para onde íamos nas quartas-feiras à tarde e aos sábados de manhã fazer experiências e perceber os fenómenos físicos e as reações químicas (uma homenagem sentida aos funcionários – Sr. Moreira e Sr. Brás, sempre dispostos a ajudarem). Neste período, uma exposição itinerante ajudou-me a fazer opções: a exposição “Os Átomos em Ação”, nos terrenos da Praça de Espanha, organizada pela comissão de Energia Atómica dos Estados Unidos da América, em abril de 1965. Algumas semanas depois dei a minha primeira palestra, na sala de Geografia do Liceu Camões, sobre Radioatividade. Deslumbrado pela área, acabei por decidir formar-me em engenharia química no IST, para depois me propor a uma pós-graduação nos Estados Unidos.



Figura 1a - Liceu Camões - O Gabinete de Física.



Figura 1b - Liceu Camões - O Laboratório de Química - interior.

2.2. O IST (1966-1971) – Engenharia Químico-Industrial – Ramo Química e Processos

Foi no IST que cresci técnica, científica e humanamente, rodeado de colegas e professores que marcaram definitivamente a minha profissão futura. Saliento alguns deles, por grande respeito: Fernando Dias Agudo (1925–2019) e o rigor matemático, António da Silveira (1904–1985) e os conceitos físicos, João Fraústo da Silva (1933–2022) na Química Inorgânica e Analítica, Bernardo Herold (1933–...) na Química Orgânica, Luís Almeida Alves (1920–1995) no Cálculo Infinitesimal e na Tecnologia Química, e Jorge Calado (1938–...) na Química-Física e Termodinâmica. Alguns assistentes de então, como Amaral de Macedo, nas Matemáticas Gerais, Ravara Roncon, na Mecânica Racional, Teresa Águas e Maria de Lurdes Gonçalves, na Química Analítica e nos Métodos Instrumentais de Análise, Horácio Novais e Maria Cândida Lóia na Química Orgânica Avançada, ajudaram-me a desbravar a ciência, a perceber modelos e a resolver problemas. Tirotínios regulamentares no LFEN (Laboratório de Física e Engenharia Nucleares) – Junta de Energia Nuclear, Sacavém, verão de 1970 e no

Laboratoire R&D, Antar, P. A., Donges, França, verão de 1971, bem como a visita à Bayer, Leverkusen, Alemanha, abril de 1971, permitiram que observasse de perto a realidade do mundo profissional exterior à Universidade, da investigação e da produção. Saliento, entretanto, a abertura dos professores João Fraústo da Silva e Jorge Calado para ser monitor de Química-Física no verão de 1970, e que foi fundamental para a minha opção de percurso académico futuro, na área da Termodinâmica Química. Para mim, a Termodinâmica era um campo árido da Ciência, cheio de símbolos matemáticos, a Química-Física adorada, mas não assimilada de forma a perceber o seu papel determinante na compreensão das propriedades dos fluidos, nomeadamente dos líquidos, fundamentais na engenharia química. As propriedades de transporte não se percebiam, e muito menos se tinha noção da sua importância para a compreensão dos fenómenos moleculares e industriais. Foi a disciplina de Complementos de Química-Física, no 5.º ano do curso de Propriedades de Gases e Líquidos lecionada por Jorge Calado, doutorado na Universidade de Oxford em 1969, que finalmente fez o *trigger* para o início da minha carreira.

2.3. O IST (1971–1980) – O início do ensino e da investigação: o CQE, a Escola de Termodinâmica, o Doutoramento, o *Imperial College*, o NBS/NIST

Entre para assistente estagiário, em outubro de 1971, para o Grupo de Disciplinas de Química-Física e aceitei o desafio para lançar a Escola de Termodinâmica do IST, liderada por Jorge Calado, com a investigação em Termodinâmica de Líquidos em Portugal. Mas,... não havia nada, para além de um pequeno laboratório de apoio ao Professor de Química-Física, onde eu, o Virgílio Soares, o Manuel Nunes da Ponte (meus colegas de curso) e o António Palavra nos propusemos dar início à investigação. Comecei por aplicar modelos moleculares às misturas líquidas, por estudar a termodinâmica estatística (molecular) dos gases, aplicar o método de Monte-Carlo ao estudo de fluidos densos, para aprofundar conceitos de estrutura molecular, forças intermoleculares e cálculo de propriedades. Jorge Calado participou, entretanto, numa conferência internacional e foi aconselhado a tentar obter informações sobre as forças intermoleculares no estado líquido, nomeadamente o potencial molecular repulsivo, através da medição da condutibilidade térmica, uma das mais importantes propriedades de transporte. A ideia era medir a condutibilidade térmica do argón líquido (ponto de ebulição normal, 87,35 K), pois os resultados de dinâmica molecular mostravam uma sensibilidade maior desta propriedade aos detalhes do potencial intermolecular. Existindo no grupo experiência de trabalho a temperaturas criogénicas, faltava a experiência e medição

experimental rigorosa de condutibilidade térmica. Jorge Calado pediu então a Joseph Kestin (1913–1993) da Universidade de Brown (EUA) o apoio ao desenvolvimento da técnica de medição da condutibilidade térmica de líquidos, que indicou um jovem pós-doutorado, já nos quadros do *Imperial College* em Londres (Reino Unido), William (Bill) Wakeham, que aceitou ser co-supervisor da minha tese de doutoramento.

E assim iniciei os meus trabalhos de doutoramento em 1973, tendo passado seis semanas, durante o verão, no Departamento de Engenharia Química do *Imperial College of Science and Technology*, em Londres. Projetou-se então a primeira instalação para se aplicar o método do fio aquecido em regime transiente aos líquidos, desenvolvido de uma forma rigorosa para gases por Joseph Kestin e Bill Wakeham, na *Brown University*, Rhode Island, EUA. A dimensão do projeto e os recursos financeiros do grupo levaram a optar, numa primeira fase, por medições entre a temperatura ambiente e 333 K, o que conduziu às minhas primeiras publicações nesta área e à minha tese de doutoramento [4–7]. A instalação foi montada no laboratório 4.23 do novo Complexo Interdisciplinar, então construído, e onde se viriam a inaugurar os laboratórios do futuro Centro de Química Estrutural, nomeadamente do Grupo 3 – Termodinâmica Experimental (Figuras 2a–2d). Fui surpreendido com a parte mais trabalhosa do meu doutoramento em vésperas da Revolução dos Cravos e os primeiros anos do pós-25 de Abril, onde a necessidade de obter dados para a tese e a esperança dum País novo eram os meus únicos pensamentos. Mas tudo terminou muito bem, com a defesa e aprovação da minha tese de doutoramento em dezembro de 1977. A utilização desta instalação com algumas adaptações conduziu depois ao doutoramento de João Fareleira (1986).

Em 1977 escrevi “... a minha tese só é possível devido à clarividência da formação científica do Prof. Jorge Calado...”; em 2003 (nos 40 anos da sua primeira publicação científica – Jorge Calado: 40 years of *Molecular Thermodynamics*) escrevi “To make tribute to Jorge Calado scientific life and strategic ability,... as bases de uma carreira científica podem explicar a trajetória seguinte, mas não o seu sucesso. Parte do meu (se algum) devo-o a si, Jorge. Obrigado por pertencer ao seu grupo.” No *After Dinner Speech* do *In Colloquium on Thermophysical Properties – The Contribution of Professor Sir William Wakeham* (3/10/2009), escrevi: “The impact of his knowledge and of his advice in the research on Thermophysical Properties in Portugal can be measured, by his support to many PhD thesis, being the real driving force for the creation of a School of Transport Properties and Processes of Fluids, since 1982 in the FCUL, natural extension of the School of Molecular Thermodynamics initiated by Professor Jorge Calado at IST”. Em 11/01/1996, sob minha proposta, o

Professor William Wakeham recebia o Doutoramento *Honoris Causa* da Universidade de Lisboa “*For all he has contributed to Science and Technology, and above all, for all he has offered to Portugal, in the name of the Faculdade de Ciências I ask for our insignias of Doutor Honoris Causa for Doctor William Arnot Wakeham, of the University of London*”. Apreendi assim a inovar com rigor, a nunca esquecer as aplicações da minha ciência. Estava já bem assente nos ombros de dois gigantes, como Isaac Newton afirmou: “*if I have seen further, it is by standing on the shoulders of giants*” [8].

A obtenção do grau de Doutor implicava ainda a elaboração de uma monografia. Atendendo à importância da transferência de massa na engenharia química, decidi-me por uma revisão crítica dos métodos de medição de coeficientes de difusão em misturas binárias [9], tendo chegado à conclusão que o mais expedito e com um rigor elevado era o método baseado na dispersão de Taylor, a que me dediquei como prioridade, nomeadamente no estabelecimento da teoria do método, no pós-doutoramento no *Imperial College (Academic Visitor)*, a partir de janeiro de 1978 [10], o meu segundo artigo em número de citações.

Figura 2a - Vista das células de condutibilidade térmica em aço inox, com ligações metal vidro, e fio de platina, com 10 μm de diâmetro (construídas nas Oficinas do Complexo Interdisciplinar - Serviços de Apoio à Investigação e Desenvolvimento).

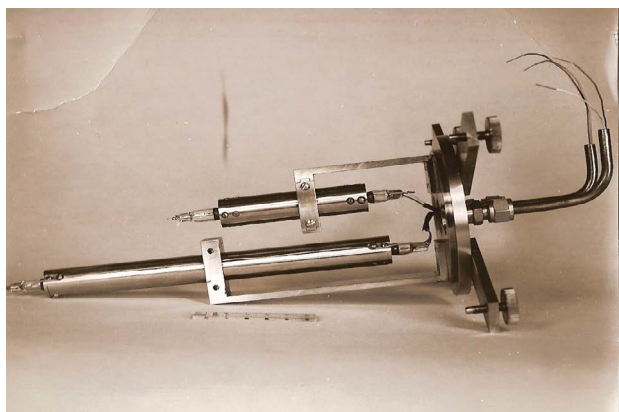
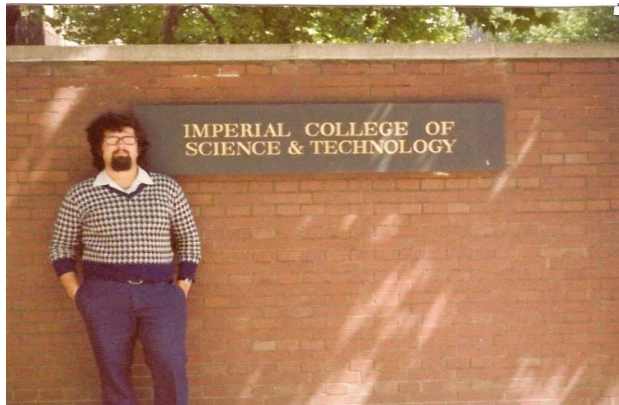


Figura 2c - *Imperial College of Science and Technology*, Londres, julho de 1973.



Outros dois vetores deste trabalho foram a teoria do método de determinação de viscosidade a altas pressões com o cristal de quartzo oscilante [11] e a abordagem da incerteza das propriedades de transporte no projeto de equipamentos de transferência de calor, apresentados na CHEMPOR 78, em Braga [12] e da classificação dos métodos de cálculo de propriedades de transporte com base no suporte teórico (previsão e estimativa) [13]. Os dois métodos experimentais foram depois implementados no CQE, e conduziram aos doutoramentos de Manuel Matos Lopes (1992) e de Fernando Vieira dos Santos (1993).

2.4. A FCUL (1980-2019)

Um acontecimento em 1980 alterou a minha atividade, nomeadamente no campo académico. Em outubro de 1980 concorri ao lugar de Professor Extraordinário de Química, na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, com uma lição “Propriedades de Transporte de Gases e Forças Intermoleculares”, e um curso de “Termodinâmica Estatística”, argumentados respetivamente pelos professores José Teixeira Dias (1944-...) da Universidade de Coimbra e José Pinto Peixoto (1922-1996). Fui aprovado em mérito absoluto e relativo e ocupei uma das vagas. A discussão com os elementos de

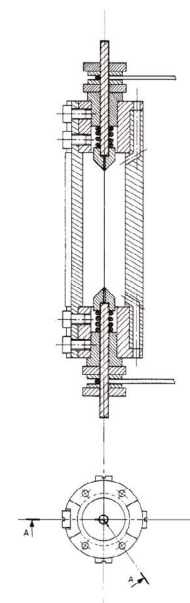


Figura 2b - Detalhe do desenho mecânico, com a geometria vertical do fio, com o peso de platina (desenho de Manuel Leal, Complexo Interdisciplinar - Serviços de Apoio à Investigação e Desenvolvimento).



Figura 2d - Prof. David Ferreira com o Microscópio Eletrónico, na Rua da Escola Politécnica - FCUL - medindo o raio do fio de platina - $5,49 \pm 0,08 \mu\text{m}$, um dos principais desafios, dezembro de 1974.

júri permitiu-me perceber que todos os meus conceitos de estrutura molecular, forças intermoleculares e termodinâmica estatística, bases da Termodinâmica Molecular, estavam bem consolidados e poderiam abrir os horizontes para um futuro inovador e consequente.

Quase 40 anos de investigação são difíceis de descrever neste texto, pelo que me limitarei a referir alguns pontos que complementam o texto escrito em 2004, por ocasião dos 40 anos da 1.ª publicação do Jorge Calado, em 2003 [14], onde se aborda a importância da Termofísica para a sociedade contemporânea e as áreas investigadas até então.

O desafio da medição da condutibilidade térmica do argon líquido, presente no início do doutoramento, foi prosseguido e conseguido, com sucesso, nos anos seguintes ao meu regresso de Londres. Duas novas colaborações foram estabelecidas, uma com Hans Roder (1930–2021) na *Thermophysics Division, National Institute for Standards and Technology* (NIST, ex-NBS), Boulder, Colorado, EUA, onde desenvolvi os meus conhecimentos na área da criogenia e ajudei a implementar o equipamento do fio aquecido em regime transiente do NIST, incluindo a sua extensão a altas temperaturas. Desde a primeira estadia no verão de 1980, várias outras estadias curtas se realizaram (1982, 1985, 1986) até à minha licença sabática em 1987/88, quando adquiri o estatuto de *Permanent Guest Scientist*. Inúmeras publicações resultaram (16 no seu total), entre as quais duas que me marcaram, com impacto na investigação em Lisboa: o estudo do propano líquido [15] e a medição a altas temperaturas, com correção da transferência simultânea de calor por radiação [16], este já com a colaboração de Richard Perkins (1956–...), para além da medição simultânea da difusividade térmica de fluidos e, por consequência, da sua capacidade calorífica, no estado gasoso, líquido e supercrítico [17]. O impacto foi grande no NIST, passando a fazer parte da história desta instituição [18].

A ideia original de medição da condutibilidade térmica do argon líquido, espécie química modelo dos químico-físicos teóricos, foi então prosseguida em Lisboa, tendo conduzido ao doutoramento de Umesh Mardolcar (1987), com o desenvolvimento de um equipamento capaz de medir no intervalo de temperaturas 80–450 K e pressões até 30 MPa [19,20], bem com a aplicação do modelo de van der Waals [21]. Quinze anos tinham decorrido desde a proposta de tese de doutoramento feita por Jorge Calado e que revelam bem a mudança entre as condições laboratoriais e financeiras em 1972 e 1987, e a contribuição da Revolução dos Cravos. Vale a pena lutar pela concretização de ideias inovadoras, pois o seu sucesso é gratificante.

Entretanto, e inspirado pelos trabalhos anteriores e pelos desafios da condutibilidade térmica dos fluidos junto ao seu ponto crítico, $0,9 < T/T_c < 2$), iniciei uma

colaboração com Bernard Le Neindre (1936–2021), no *Laboratoire des Interactions Moléculaires et Hautes Pressions*, CNRS, Villeteuse, Paris, França em 1981, utilizando o equipamento mais rigoroso para a região crítica, os cilindros concêntricos em regime estacionário. Foi possível medir a condutibilidade térmica do *n*-butano, em intervalos alargados de temperatura e pressão (298–601 K, pressões até 70 MPa), o estado gasoso, diluído e denso, o estado líquido e a região supercrítica, explorando a divergência da condutibilidade térmica junto ao ponto crítico (*critical enhancement*) e as leis de escalamento (*scaling laws*) [22] (Figuras 3a e 3b). Várias outras estadias (1987, 1989, 1991, 1992, 1993), permitiram determinar densidades e condutibilidades térmicas de refrigerantes alternativos, não destruidores da camada de ozono. Iniciei as minhas funções de Professor na FCUL, na Rua da Escola Politécnica, em março de 1982, deixando o conforto da minha Escola de formação, o IST, mas continuando ainda a minha investigação, e até 1994, no Centro de Química Estrutural, no Complexo Interdisciplinar.

A ligação com Bill Wakeham foi-se consolidando, tanto profissional como pessoalmente. Inúmeras visitas a Lisboa, e minhas a Londres, periodicamente entre 1982 e 1988, então como *Visiting Professor*, permitiram uma colaboração permanente no arranque de instalações experimentais novas em Lisboa (difusão, viscosidade, condutibilidade térmica de soluções condutoras, com Maria de Lurdes Ramires (1992), condutibilidade térmica a altas temperaturas, com Maria José Lourenço (1998), viscosidade a altas temperaturas, com Valentim Nunes (2006), bem como a condutibilidade térmica a muito altas pressões (430 MPa), nas instalações do *Imperial College*. O arranque do Subcomité de Propriedades de Transporte de Fluidos da Comissão de Termodinâmica da IUPAC, em 1981 (hoje *International Association for Transport Properties* [23]), por iniciativa do saudoso Joseph Kestin, da qual sou membro desde a sua origem, foi fundamental no estabelecimento de laços de colaboração com imensos colegas, e o desenvolvimento de uma estratégia de investigação no meu grupo em Lisboa. A abordagem científica dos fenómenos estudados pode resumir-se no diagrama da Figura 4, tendo como base a Física, a Química, nomeadamente a Química-Física e a Termodinâmica.

Mantenho um especial interesse por tópicos relacionados com interações moleculares e estrutura e estabilidade de fases líquidas e gasosas, puras e multicomponentes, e o seu reflexo macroscópico nas propriedades e nos processos tecnológicos (a “ponte” entre o mundo nano/micro e o macro, o desafio intelectual de Ludwig Boltzmann [24]). Estudei moléculas não polares, moléculas polares, moléculas associadas, iões e sistemas gasosos com reação. Naturalmente, chegámos aos sistemas mais complexos, como os líquidos iónicos,

os nanossistemas (líquidos iónicos com nanomateriais – loNanofluidos) e meta-estabilidade em líquidos iónicos.

Um dos principais efeitos deste trabalho internacional foi o estabelecimento de dados padrão de referência para as propriedades de transporte de fluidos, e cuja primeira publicação surgiu em 1985 para a condutibilidade térmica de vários líquidos [25]. A publicação que teve (e continua a ter) mais impacto, foi a referente à água, hoje com mais de 500 citações! [26] e a mais

recente, na área dos líquidos iónicos [27]. Esta atividade foi fundamental para a melhoria do rigor das medições experimentais de propriedades de transporte, pela ferramenta que oferece para assegurar a qualidade dos instrumentos em qualquer laboratório, rastreáveis as condições metrológicas exigidas, seja dos primários, para verificação, seja dos secundários, para calibração. A minha ligação à Metrologia inicia-se com o financiamento do PEDIP-1 e PEDIP-6 do Instituto de Ciência Aplicada

Figura 3a - A condutibilidade térmica do *n*-butano, destacando-se as zonas correspondentes à fase gasosa, fase líquida e região supercrítica. Adaptado da ref. [22]. Cortesia de caldeirafotógrafo, Lisboa.

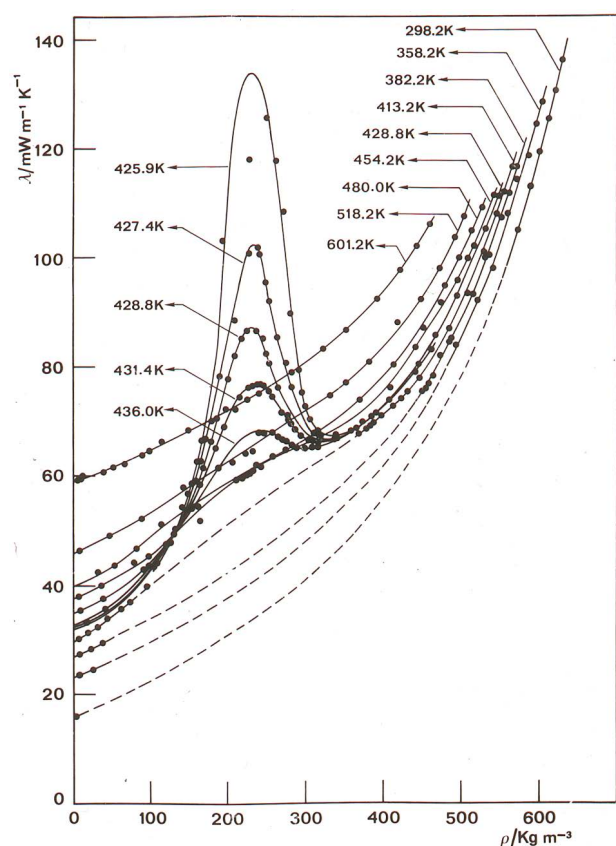
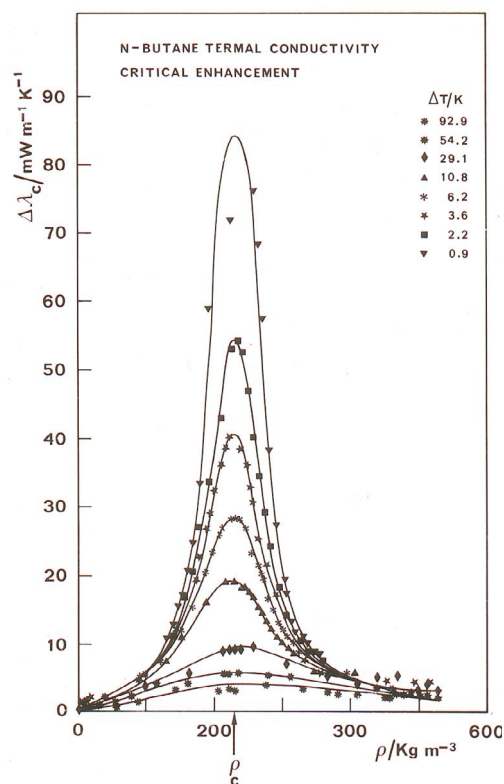


Figura 3b - A divergência da condutibilidade térmica do *n*-butano na região supercrítica, em função da densidade, para vários valores de $\Delta T = T - T_c$. T_c e ρ_c são respetivamente a temperatura e a densidade críticas. Adaptado da ref. [22]. Cortesia de caldeirafotógrafo, Lisboa.



Desenvolver métodos rigorosos de medição de propriedades termofísicas – estado de arte para a propriedade dada, no intervalo de T, P visado, e demonstrar o seu valor metrológico,

Abordar a teoria do método de medição sempre que necessário,

Estabelecer dados padrão de referência para as propriedades dos fluidos,

Correlacionar, prever e estimar as propriedades dos fluidos, incluindo a simulação molecular,

Usar a mecânica estatística e os primeiros princípios sempre que possível.

Figura 4 - Esquema da estratégia de investigação definida pelo autor.

e Tecnologia, em 1982, no *campus* da FCUL, e do seu Laboratório de Metrologia e Ensaios (LME-ICAT) (1986-2004), acreditado pelo IPQ, onde os métodos rigorosos de medição de propriedades termofísicas ficaram ao

dispor das empresas e laboratórios nacionais, mesmo nas suas instalações, continuando na Vice-Presidência do IPQ (2001-2004), e tendo então sido eleito para o Comité Executivo da EUROMET (2003) (Figuras 5a-5c).

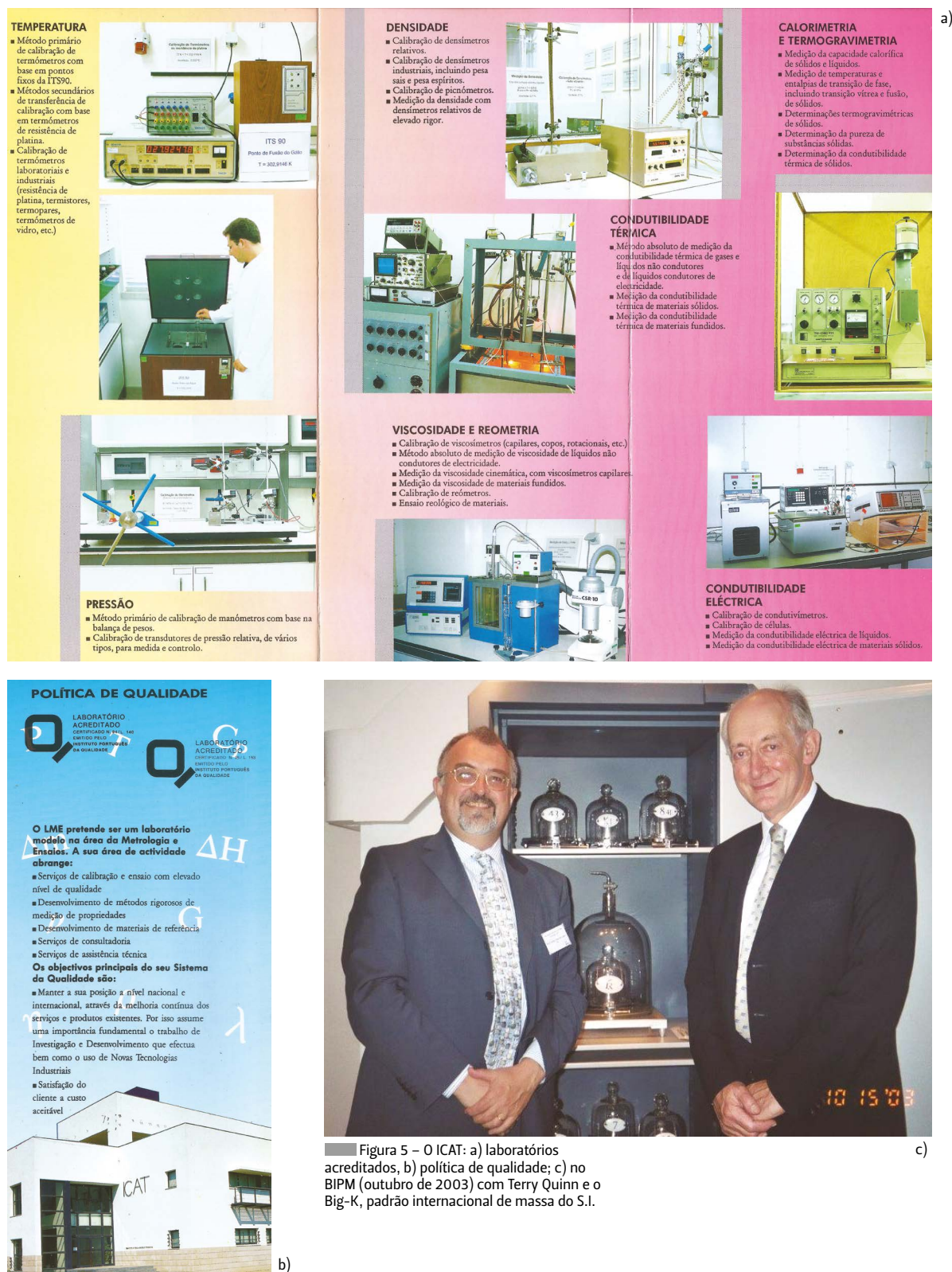


Figura 5 – O ICAT: a) laboratórios acreditados; b) política de qualidade; c) no BIPM (outubro de 2003) com Terry Quinn e o Big-K, padrão internacional de massa do S.I.

Assim apareceu o meu lema “*Não basta fazer ou fazer bem! É preciso saber fazer bem e com rigor!*”, que foi desenvolvido e aplicado à necessidade de responder a problemas mundiais, nas áreas do ambiente – a destruição da camada de ozono (refrigeração), os novos solventes e fluidos de engenharia (líquidos iónicos, IoNanofluidos), energia (novos fluidos de transferência de calor, “HTFs”, novos pigmentos para tintas solares, energia solar térmica), recursos naturais e novos materiais (resinosos, nanomateriais naturais, biomassa, novas ligas metálicas) com vista ao que se designa atualmente por *produção sustentável e economia circular*. Vários projetos foram desenvolvidos e concretizados no CQE (1977-1994), CITECMAT (1995-2002), CCMM (2002-2014), e CQE (desde 2015) e que conduziram a teses de doutoramento, tais como a densidade, viscosidade e capacidade calorífica de produtos resinosos (Ana Sousa, 1994; Magda Sampaio, 1997), as equações de estado, densidade e a constante dielétrica e condutibilidade térmica de refrigerantes alternativos (Paulo Fialho, 1993; Ana Sousa, 1994; Teresa Barão, 1995, com Umesh Mardolcar), a condutibilidade térmica de refrigerantes, líquidos polares condutores de eletricidade (Anélia Gurova, 1996, com Umesh Mardolcar), a simulação por

dinâmica molecular de viscosidade e condutibilidade térmica de sistemas iónicos (Nuno Galamba, 2004, com James Ely, *Colorado School of Mines*, Golden, Colorado, EUA), o equilíbrio líquido-vapor a altas temperaturas (Ana Cristino, 2014, com António Palavra, IST), os líquidos iónicos e suas dispersões com nanomateriais naturais e sintéticos, os IoNanofluidos (Ana Paula Ribeiro, 2012, e Salomé Vieira, 2015, com Maria José Lourenço), incluindo ainda simulação molecular (João França, 2017, com Agílio Pádua, *Université Blaise Pascal*, Clermont-Ferrand, França). E finalmente, ainda em curso, a produção de micro e nano-catalisadores por precipitação supercrítica anti-solvente (Luís Nobre, 2022, com Beatriz Nobre, IST e Mário Calvete, Universidade de Coimbra). A noção de que não se podem projetar equipamentos para operações tecnológicas na indústria química e associadas sem usar dados das propriedades termofísicas confiáveis e com qualidade (adequados à exigência da aplicação) constituiu a base da nossa intervenção em vários artigos sobre a incerteza das propriedades de transporte no projeto de equipamentos de transferência de calor [12,28-33].

A Figura 6 apresenta uma árvore científica esquemática de todos os campos científicos estudados.

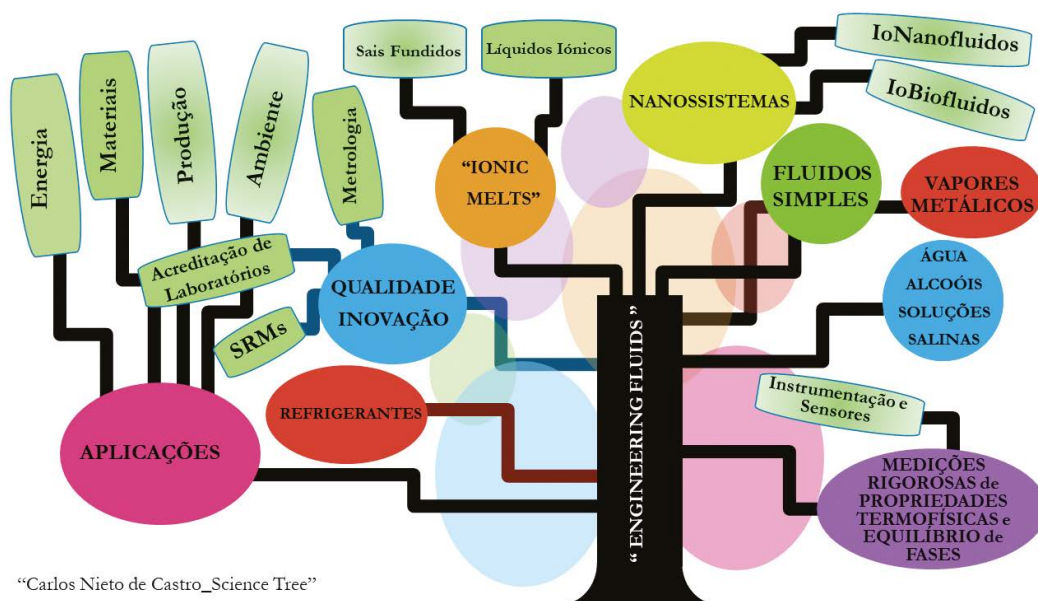


Figura 6 – Carlos Nieto de Castro – Árvore científica.

3. A árvore genealógica científica

3.1. Metodologia

Conforme referido na introdução, o traçar da genealogia profissional, neste caso na área da Química, envolve a linha intelectual descendente de um ou mais orientadores do meu doutoramento [3]. Para cada cientista identificado nas raízes, faz-se uma pequena descrição da sua área de trabalho, comentando-se seguida-

mente a possível influência no percurso intelectual do cientista. Identificadas as raízes, seguiram-se os descendentes científicos e as colaborações, forma de também se analisar o legado científico. Este legado não será completamente descrito neste trabalho, mas pode ser consultado, tal como a árvore genealógica, na *Chemical Genealogy Database (CGD) Homepage*, desenvolvida pela Universidade de Illinois [3]. Dado que

tive dois orientadores, Jorge Calado e Bill Wakeham, o ramo não é único, tendo logo à nascença, duas raízes. A primeira segue a via Jorge Calado, Lionel Sateveley, Klaus Clusius, Arnold Eucken, Walther Nernst e Ludwig Boltzmann, enquanto a segunda segue William Wakeham, Kenneth Grew, Thomas Lowry, Henry Armstrong, Adolph Kolbe, Robert Bunsen e Friedrich Stromeyer. Os leitores poderão identificar vários cientistas notáveis da história da Química (e da Física), o que muito honra a minha ascendência científica.

A *Academictree.org* permite construir a árvore genealógica de cada cientista, com a introdução dos supervisores, descendentes (doutoramento, mestrado, pós-doutoramentos e colaboradores), e que conduz à compreensão da ascendência e descendência científica. Escolhi a árvore da Química, embora Ludwig Boltzmann só esteja na árvore da Física, mas que se consegue ligar [3], com acesso de Carlos A. Nieto de Castro (ID: 859426) [34]. A Figura 7 mostra a parte dos antecessores (as raízes científicas), por razões de dimensão deste artigo. Aparecem também influências de outros cientistas (que ainda não coloquei no meu caso), sendo de salientar, para a termodinâmica molecular, a influência de Johannes Diderik van der Waals e Wilhelmus Hendrikus Keesom em Klaus Clusius, e a de Cyril Noman Hinshelwood em Lionel Staveley.

3.2. Referência breve à atividade científica dos cientistas

Nesta secção faz-se uma pequena descrição da área de trabalho de cada um destes cientistas, através das Tabelas 1a e 1b, onde se identificam o cientista, a universidade, a data e a especialidade do seu doutoramento (ou equivalente), o(s) supervisor(es)/mentor(es), a sua área de trabalho, bem como a referência principal de recolha de dados. Não tendo espaço para ilustrar todos

os cientistas envolvidos, dou como exemplo a célebre fotografia (Figura 8) de Ludwig Boltzmann, com os seus colaboradores na universidade de Grätz, em 1887, no mesmo ano do doutoramento de Walther Nernst. Esta fotografia é muito importante para perceber a relação Nernst-Boltzmann, pois identifica a presença de Nernst em Grätz, onde desenvolveu parte da sua investigação para o seu doutoramento [24]. Cercignani considera-o como um dos melhores estudantes de Boltzmann (de facto!), pelo que neste artigo consideramos Ludwig Boltzmann como co-supervisor de Walther Nernst, com Friedrich Kohlrausch (Würzburg).

Figura 8 - Ludwig Boltzmann e colaboradores em Grätz, 1887. Da esquerda para a direita, de pé: Walther Nernst, Heinrich Streintz, Svante Arrhenius e Richard Hiecke; sentados: Eduard Aulinger, Albert von Ettingshausen, Ludwig Boltzmann, Ignacij Klemenčič e Victor Hausmanninger. Autores: Pal Fearn/Alamy/Cordon Press. Domínio público.



Figura 7 - Carlos A. Nieto de Castro Chemistry Tree [34] - antecessores.

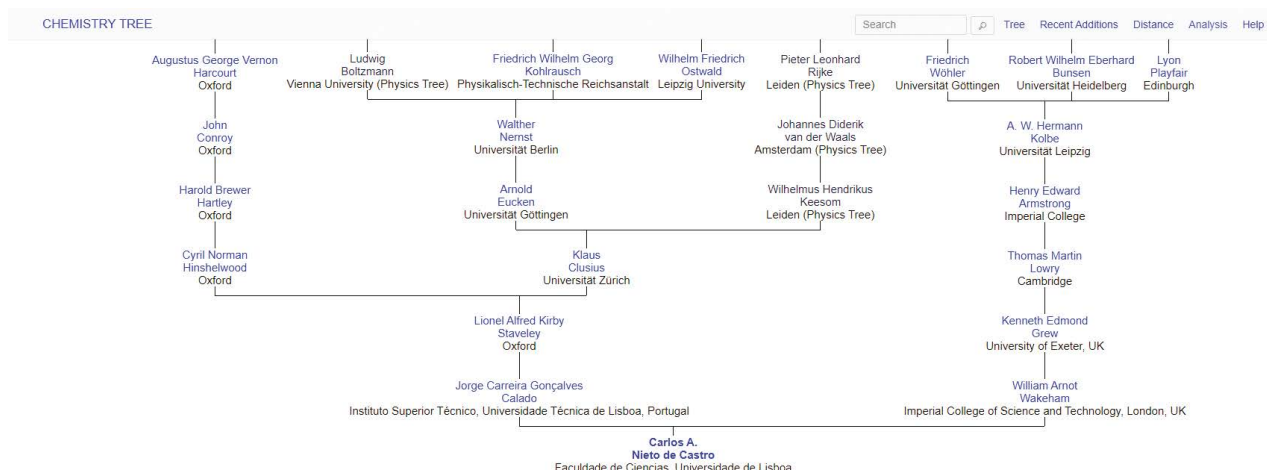


Tabela 1a – Dados sobre a atividade científica dos cientistas da árvore genealógica do autor (raiz Jorge Calado).

Cientista	Universidade	Doutoramento	Supervisor / Mentor	Área de trabalho	Referência
Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906) (LB)	Viena, Áustria	1866 (Física)	Joseph Stefan / August Toepler (Gráz)	Irreversibilidade e teoria cinética dos gases (Eq. de Boltzmann); interpretação estatística da entropia; mecânica estatística do equilíbrio; teoria atômica; energética; filosofia (incluindo ciência); considerado o Pai da Mecânica Quântica.	[24]
Hermann Walter Nernst (1864-1941) (HWN)	Würzburg, Alemanha	1887 (Física)	Friedrich Wilhelm Georg Kohlrausch / HWN foi assistente de investigação em Gráz de LB, enquanto trabalhava para o seu doutoramento / Assistente de Friedrich Wilhelm Ostwald (Leipzig)	Prémio Nobel em 1920, Termodinâmica Química. Descoberta da 3.ª Lei da Termodinâmica; Eletroquímica (Eq. de Nernst, eléctrodo de hidrogénio como padrão); desenvolveu métodos de medição de constantes dielétricas, capacidades caloríficas a baixas temperaturas, densidades de vapor; constantes de equilíbrio a altas pressões, grau de hidratação iónica e pH por indicadores. Teoria da elevação ebulioscópica, produtos de solubilidade e soluções tampão. Existência do ião hidreto.	[24,35]
Arnold Thomas Eucken (1884-1950) (ATE)	Berlin, Alemanha	1906 (Física)	HWN	Capacidade calorífica a temperaturas muito baixas, estrutura de líquidos e soluções eletrolíticas, física molecular (rotação, oscilação), em deutério e água pesada. Aproximação de Eucken da condutibilidade térmica de gases poliatômicos. Cinética de reações gasosas homogêneas e heterogêneas, catálise, engenharia química e química tecnológica.	[36]
Klaus Paul Alfred Clusius (1903-1963) (KPAC)	Technische Hochschule Breslau, Alemanha	1926 (Física)	ATE	Capacidade calorífica de sólidos a baixa temperatura. Propriedades da água pesada (D ₂ O). Química nuclear. Separação dos isótopos de cloro (difusão térmica). Separação e enriquecimento de isótopos estáveis. Calorimetria de alto rigor. Métodos para produção de isótopos de nitrogénio e oxigénio em larga escala.	[37]
Lionel Alfred Kirby Staveley (1914-1996) (LAKS)	Munique, Alemanha	1938 ^a	KPAC	Capacidade calorífica de sólidos a baixa temperatura. Efeitos das composições isotópicas no ponto triplo de líquidos criogénicos. Propriedades de gases simples liquefeitos e suas misturas. Hidrólise e ligações de hidrogénio em soluções de água com vários solventes e de álcoois em solventes não-polares. Ordem e desordem em cristais (posição, orientação e magnética).	[38]
Jorge Carreira Gonçalves Calado (1938-...)	Oxford, Reino Unido	1970 (DPhil)	LAKS	Termodinâmica de fluidos moleculares e suas misturas. Energética de reações químicas. Baixas temperaturas e altas pressões. Condutibilidade térmica de líquidos.	Notas pessoais do autor

^a De facto Lionel Staveley não defendeu a sua tese em Munique, devido ao início da 2.ª Grande Guerra Mundial. No entanto o seu trabalho foi reconhecido em Oxford, com a sua eleição como *Fellow* e Tutor no *New College*, Oxford, tendo mais tarde recebido o título de *Doctor of Science*, também na Universidade de Oxford [38].

Tabela 1b – Dados sobre a atividade científica dos cientistas da árvore genealógica do autor (raiz William (Bill) Wakeham).

Cientista	Universidade	Doutoramento	Supervisor / Mentor	Área de trabalho	Referência
Friedrich Stromeyer (1776-1835) (FS)	Göttingen, Alemanha	1800 (MD) (Química)	Johann Friedrich Gmelin e Louis Nicolas Vauquelin	Descoberta do cádmio em 1817. Química da arsina (AsH ₃) e dos sais de bismuto. Descoberta do mineral eudialite (nos sienitos nefelínicos) em 1819. Mineral stromeyerite (AgCuS) nomeado em sua honra em 1832. Iniciou o primeiro laboratório alemão de ensino experimental da química.	[39]
Robert Wilhelm Eberhard Bunsen (1811-1899) (RWEB)	Göttingen, Alemanha	1831 (Química)	FS	Descobriu os compostos organo-arsénicos (primeiro antídoto eficaz para envenenamento por arsénio); inventou o espectroscópio e a análise espectroquímica com Kirchhoff, com quem descobriu o célio, o rubídio, e o lítio isolado; co-fundou com Roscoe a Fotoquímica; especialista em métodos gasométricos; inventou o queimador de Bunsen; primeiro a propor a explicação correta do funcionamento dos geisers; desenvolveu o primeiro processo eletrolítico em larga escala para a produção de magnésio metálico.	[40]

Tabela 1b (cont.) – Dados sobre a atividade científica dos cientistas da árvore genealógica do autor (raiz William (Bill) Wakeham).

Cientista	Universidade	Doutoramento	Supervisor / Mentor	Área de trabalho	Referência
Adolph Wilhelm Hermann Kolbe (1819-1884) (AWHK)	Marburg, Alemanha	1843 (Química)	RWEB e Friedrich Wöhler	Pioneiro no desenvolvimento de fórmulas estruturais para compostos orgânicos; realizou a segunda “síntese total” de um composto orgânico (ácido acético) a partir de precursores inorgânicos; introduziu o termo “síntese” na linguagem química; sintetizou o ácido salicílico e mostrou o seu valor como conservante; descobriu o ácido triclorometano-sulfônico e o nitrometano; descobriu a hidrólise dos nitrilos a ácidos carboxílicos; previu a existência de álcoois secundários e terciários; sintetizou a taurina, o ácido malônico e o formato de potássio; determinou a composição do ácido láctico, da alanina, e do ácido amino-acético; primeiro a aplicar a eletrólise à síntese; identificou o grupo funcional carbonilo.	[41]
Henry Edward Armstrong (1848-1937) (HEA)	Leipzig, Alemanha	1869 (Química)	AWHK	Desenvolveu (com Frankland) um método para determinar impurezas orgânicas nos esgotos e de matéria de esgoto na água potável; estudou a química de substituição da naftalina, permitindo que os fabricantes de corantes tivessem algum controle nos produtos derivados da naftalina; investigou a química da substituição de derivados de benzeno, p. ex. a anilina, e estudou a morfologia cristalina dos benzenos substituídos; originou a teoria das quinonas para a cor de corantes; estudou a constituição da cânfora e seus derivados, e enzimas vegetais. Fundou o 1.º curso de três anos de engenharia química na <i>Central Institution</i> em Londres, precursor do <i>Imperial College</i> .	[42]
Thomas Martin Lowry (1874-1936) (TML)	Central Technical College, Londres, Reino Unido	DSc (1899)	HEA	Teoria ácido-base de Brønsted-Lowry; rotação ótica (enantiômeros).	[43]
Kenneth Edmond Grew (1912 (?)-1971)	Cambridge, Reino Unido	1936 (Química)	TML	Eletrodeposição do hidrogênio; capacidade da dupla camada; difusão térmica em gases.	Cambridge University Library (16/04/2019)
Sir William Arnot Wakeham (1944-...)	Exeter, Reino Unido	1969 (Física)	KEG	Difusão térmica em gases. Propriedades de transporte e termodinâmicas (termofísicas) de fluidos, em gamas alargadas de pressão e temperatura. Nova instrumentação de medição rigorosa de propriedades termofísicas. Condutibilidade térmica, coeficientes de difusão, viscosidade. Sensores. Previsão e estimativa de propriedades. Projeto tecnológico de equipamentos da indústria química.	Notas pessoais do autor

3.3. A árvore, as raízes e os ramos

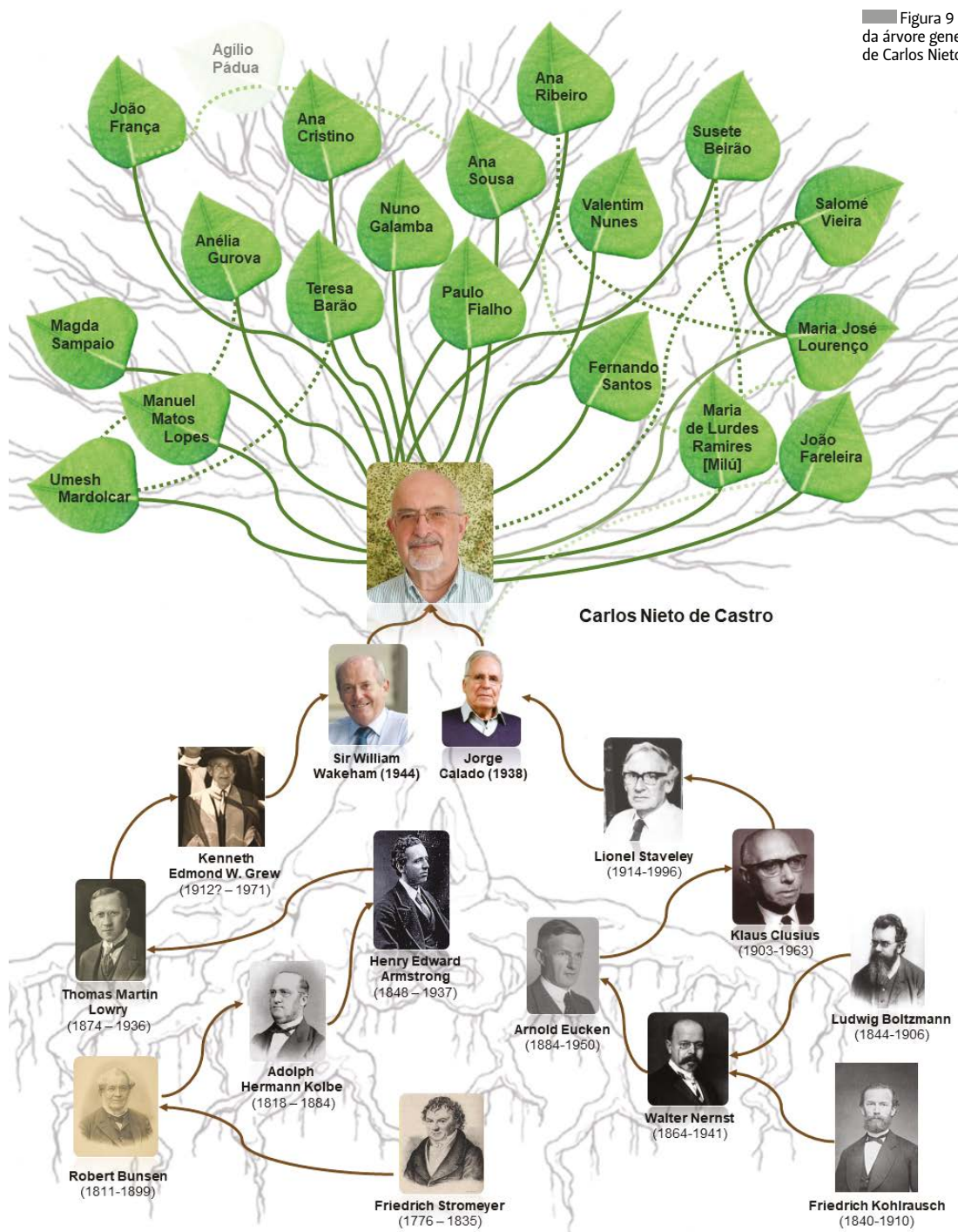
O conceito de árvore genealógica, com raízes (os ascendentes) e ramos (os descendentes), ilustra, de forma conveniente, necessariamente com informação limitada, o ambiente científico de cada autor (Figura 9). No que respeita aos estudantes que obtiveram doutoramentos sobre a minha orientação (ou co-orientação, a ponteados) apresentamos a informação no setor ramos da árvore.

4. O futuro da Termofísica

A Termofísica teve uma evolução muito grande na 2.ª metade do século XX. Saliento a contribuição fundamental do Professor Joseph Kestin (1913-1993), na Universidade de Brown, Rhode Island, EUA. A sua clarividência permitiu que não se construíssem equipamentos de medição de propriedades termofísicas sem se basearem em modelos físicos adequados, com

resolução matemática e equações de trabalho, com correções resultantes do afastamento do modelo ideal ao modelo real, construído no laboratório, minimizando estes afastamentos por um projeto cuidado e racional do equipamento. Em colaboração com o Professor Edward Mason (1926-1994), estabeleceu os modelos moleculares fundamentais para o cálculo das propriedades de transporte de gases e suas misturas e a extensão do princípio de estados correspondentes para aplicações científicas e industriais. Esta filosofia foi transmitida a dois grandes discípulos seus, o Professor Akira Nagashima, da Universidade de Keio, Yokohama, Japão e William Wakeham, do *Imperial College*, Londres, Reino Unido, e meu supervisor. Dada a importância da interpretação dos fenómenos junto a pontos críticos G-L, G-L-L, e meta-estabilidades, seja do ponto de vista experimental como teórico, é justo salientar as contribuições do Professor Ian Sengers (1931-...), da Universidade de

Figura 9 - Raízes e ramos da árvore genealógica científica de Carlos Nieto de Castro.



Maryland. Nesta fase, as técnicas rigorosas de medição foram desenvolvidas pela primeira vez (1950-1970). Esta visão originou a expansão da Termofísica de fluidos no mundo inteiro entre 1970 e 1986, gerando várias escolas noutros países, nomeadamente europeus e asiáticos, e nas quais se inclui a de Lisboa (que iniciei com o meu doutoramento no IST) e contribuindo para o patamar da Termofísica entre 1986 e 2000. As mesmas técnicas experimentais, com algumas pequenas modificações, foram aplicadas a uma gama maior de fluidos, com

moléculas mais complexas, e em gamas alargadas de temperatura e pressão. No intervalo 1986-2000 atingiu-se a "estabilidade" das medições, o patamar da Termofísica, com os mesmos métodos de medição, com aplicações a novos refrigerantes, exigidas pelo protocolo de Montreal (1987). A partir de 2000 novos sistemas, incluindo os nanossistemas, obrigaram a adaptações e modificações nas metodologias utilizadas até então. A Figura 10 ilustra esquematicamente esta evolução. Qual o futuro? A Entropia prevalece...

Fazer boas medições de propriedades termofísicas é difícil e demorado, e não está na moda nem é economicamente atraente para as indústrias e agências de financiamento. A necessidade de dados rigorosos sobre propriedades termofísicas dos fluidos foi substituída, até certo ponto, por métodos alternativos de cálculo de propriedades, principalmente com base em simulação de computador ou metodologias de previsão/estimativa (mais baratas, mas mais arriscadas) [35]. As razões para esta situação devem-se a:

- Mudança de necessidades – Do trabalho de laboratório, local, às medições *in situ*;
- Mudança de paradigma – Adequado para o fim em vista, em vez da melhor incerteza;
- Mudança das prioridades de financiamento das agências estatais de financiamento – Prioridade para a pesquisa orientada/patrocinada pelo setor industrial;
- Decréscimo para a indústria do valor acrescentado dos dados de propriedade de boa qualidade;
- O uso exagerado e indevido de equipamentos comerciais, com métodos de medição não adequados aos sistemas em estudo e ao estado termodinâmico envolvido.

As novas tendências de pesquisa em Termofísica são: 1) Materiais para engenharia nuclear; 2) Materiais para armazenamento térmico; 3) Corpos planetários (propriedades térmicas e fluxo térmico); 4) Sais fundidos para aplicações solares; 5) Propriedades térmicas de rochas de reservatórios petrolíferos e de gases; 6) Materiais macios (têxteis, produtos alimentares, fluidos corporais); 7) Indústria siderúrgica/ligas (produtos de fundição e ligas especiais); 8) Nanofluidos e loNanofluidos (não aquosos e altas temperaturas); 9) Produtos químicos conformes com o REACH (*Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals*) e as exigências ambientais e de saúde; 10) Propriedades termofísicas da água do mar (superficial e profunda); e 11) Novos lubrificantes.

A Cooperação Internacional é fundamental. A EURAMET (*European Association of National Metrology Institutes*) identificou que os principais gatilhos sociais e económicos que impulsionam o desenvolvimento de medições termofísicas são a energia, o meio ambiente, a produção e o processamento avançado (controlo digital), segurança e saúde [45]. Assim, a metrologia para propriedades termofísicas contribuiu substancialmente para as prioridades “Desafios Societais”, em foco no programa Horizon Europe 2020 e estará presente nas suas extensões para os próximos anos. Na Agenda 2030, que reúne 17 objetivos de desenvolvimento sustentável e 169 metas, num compromisso que respeita a qualidade de vida das próximas gerações, estou certo que a Termofísica terá um papel de destaque, principalmente nas energias renováveis e acessíveis, na indústria,

inovação e infraestruturas, nos consumos e produções responsáveis, e na ação climática e proteção da vida.

Como James Dewar (1842-1923) disse um dia “*Minds are like parachutes. They only function when they are open*”. A sociedade precisa de cidadãos, cientistas e empreendedores que apliquem este pensamento. A Termofísica precisa de pessoas com entusiasmo para novas ideias, de criatividade para influenciar o futuro que se pretende sustentável, em quem agentes financiadores e inovadores deem o seu apoio.

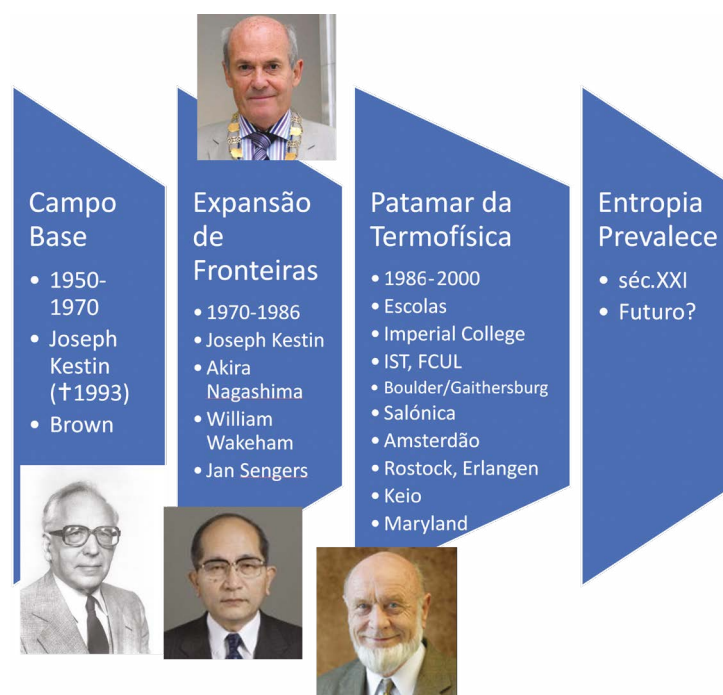


Figura 10 – Evolução e futuro da Termofísica. Fundador, expansores, patamar, e séc. XXI. Adaptada da ref. [44], direitos do autor.

Dedicatória

Dedico este trabalho a todos os meus Professores e Mentores.

Agradecimentos

Agradeço a todos os meus estudantes e colaboradores por aquilo que contribuíram para a minha felicidade científica e humana, ao receberem os meus ensinamentos e sugestões... Uma palavra especial para a Maria de Lurdes Ramires, aluna e colaboradora notável, cuja vida foi injustamente ceifada em 2004, e para os meus colaboradores Valentim Nunes, Maria José Lourenço e Ana Cristino, pelo apoio que me deram ao arranque da árvore científica e a genealogia académica. Como Fernando Pessoa (1888-1935) disse um dia, “... *O valor das coisas não está no tempo que elas duram, mas na intensidade com que acontecem. Por isso existem momentos inesquecíveis, coisas inexplicáveis e pessoas incomparáveis.*”

Referências

- [1] V. Nunes, M. J. Lourenço, F. Santos, C. A. Nieto de Castro, "Twenty Years of Research on Thermophysical Properties of High Temperature Fluids", *IAREC2017, Proceedings of the International Advanced Research and Engineering Congress*, Recep Halicioğlu et al. (eds.), Osmaniye, Turquia, 16-18 novembro, **2017**, 1500-1507. ISBN 978-605-245-037-6. iarec.osmaniye.edu.tr/21963_kongre-k%C4%B0tabi.html.
- [2] C. A. Nieto de Castro, "Vou dar Aula", *Jornadas da Química Tecnológica* – 2019, 10 de maio de **2019**, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Portugal.
- [3] *Chemical Genealogy Database Homepage*: web-genealogy.scs.illinois.edu/index.php (acedido entre maio 2019 e outubro 2021).
- [4] C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, J. C. G. Calado, *Rev. Port. Quím.* **1975**, 17, 78-85. spq.pt/magazines/RPQuimica/285/772.
- [5] C. A. Nieto de Castro, J. C. G. Calado, W. A. Wakeham, M. Dix, *J. Phys. E, Sci. Instr.* **1976**, 9, 1073-1080. DOI: 10.1088/0022-3735/9/12/020.
- [6] C. A. Nieto de Castro, J. C. G. Calado, W. A. Wakeham, "Absolute measurements of the thermal conductivity of liquids using a transient hot wire technique", *Proc. 7th Symp. Therm. Prop.*, ASME (ed.) **1977**, 730-253.
- [7] C. A. Nieto de Castro, "Medida da Condutibilidade Térmica de Hidrocarbonetos Líquidos pelo Método do Fio Aquecido", Tese de Doutoramento em Ciências de Engenharia (Termodinâmica Química), Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, julho **1977**.
- [8] I. Newton, *Letter from Sir Isaac Newton to Robert Hooke*, **1645**, *Historical Society of Pennsylvania*, digitallibrary.hsp.org/index.php/Detail/objects/9792 (acedido a 25/10/2017).
- [9] C. A. Nieto de Castro, "Métodos Experimentais de Medida de Coeficientes de Difusão em Misturas Líquidas Binárias – Revisão Crítica", Trabalho Complementar para a obtenção do grau de Doutor em Ciências de Engenharia (Termodinâmica Química), Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, outubro **1977**.
- [10] A. Alizadeh, C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, *Int. J. Thermophys.* **1980**, 1, 243-284 (538 citações, no Google Scholar, em 3/4/2022). DOI: 10.1007/BF00517126.
- [11] C. A. Nieto de Castro, "Fluid viscosity measurements with the torsionally vibrating crystal", in *Transport Properties of Fluids and Fluid Mixtures*, HMSO (ed.), Edimburgo, Reino Unido, **1980**.
- [12] M. J. Assael, C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, "The estimation of the transport properties of fluids, Part II – The economic advantages of accurate transport property data", *Proc. Inter. Chem. Eng. Conf.*, CHEMPOR 78, Braga, Portugal, **1978**, 16.1-16.9.
- [13] C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, "The estimation of the transport properties of fluids, Part I – Philosophy and Methods", *Proc. Inter. Chem. Eng. Conf.*, CHEMPOR 78, Braga, Portugal, **1978**, 15.1-15.15.
- [14] C. A. Nieto de Castro, *Química* **2003**, 89, 43-46. DOI: 10.52590/M3.P614.A30001128.
- [15] H. M. Order, C. A. Nieto de Castro, *J. Chem. Eng. Data* **1982**, 27, 12-15. DOI: 10.1021/je00027a002.
- [16] R. A. Perkins, H. M. Order, C. A. Nieto de Castro, *J. Res. NIST, USA* **1991**, 96, 247-269. DOI: 10.6028/jres.096.014.
- [17] H. M. Order, C. A. Nieto de Castro, *Cryogenics* **1987**, 27, 312-313. DOI: 10.1016/0011-2275(87)90060-9.
- [18] U. V. Mardolcar, J. M. N. A. Fareira, C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, *High Temp. - High Press.* **1985**, 17, 469-476.
- [19] J. F. Schooley, *Responding to National Needs: The National Bureau of Standards Becomes the National Institute of Standards and Technology*, 1969-1993, *Special Publication* (NIST SP 955), *National Institute of Standards and Technology*, Gaithersburg, MD, **2000**. Citado nas páginas 712-713.
- [20] U. V. Mardolcar, C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, *Int. J. Thermophys.* **1986**, 7, 259-272. DOI: 10.1007/BF00500153.
- [21] J. C. G. Calado, U. V. Mardolcar, C. A. Nieto de Castro, H. M. Roder, W. A. Wakeham, *Physica* **1987**, 143A, 314-325. DOI: 10.1016/0378-4371(87)90071-9.
- [22] C. A. Nieto de Castro, R. Tufeu, B. le Neindre, *Int. J. Thermophys.* **1983**, 4, 11-33. DOI: 10.1007/BF00504479.
- [23] *International Association for Transport Properties*: ltpet.com/index.php/iatp/terms (acedido em 03/05/2022).
- [24] Vários artigos publicados por Ludwig Boltzmann abrem caminho para sua interpretação do mundo, o significado estatístico da entropia e do caos (ordem/desordem), dos mundo micro e macro. Uma análise excelente pode encontrar-se no livro de C. Cergignani, "Ludwig Boltzmann. The man who trusted atoms", Oxford University Press, Oxford, **1998**. ISBN – 0-19-850154-4. Um excelente artigo de divulgação foi publicado por E. Arroyo-Pérez, "Boltzmann – A Termodinâmica e a Entropia – O universo morrerá de frio", *National Geographic*, Edição Especial, **2018**, 135 pp.
- [25] C. A. Nieto de Castro, S. F. Y. Li, A. Nagashima, R. D. Trengove, W. A. Wakeham, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1986**, 15, 1073-1086. DOI: 10.1063/1.555758.
- [26] M. L. V. Ramires, C. A. Nieto de Castro, Y. Nagasaka, A. Nagashima, M. J. Assael, W. A. Wakeham, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1995**, 24, 1377-1381 (538 citações, no Google Scholar, em 03/05/2022). DOI: 10.1063/1.555963.
- [27] X. Paredes, C. S. G. P. Queirós, F. J. V. Santos, A. F. Santos, M. S. C. S. Santos, M. J. V. Lourenço, C. A. Nieto de Castro, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2020**, 49, 043101. DOI: 10.1063/5.0023160.
- [28] A. J. F. Mendonça, C. A. Nieto de Castro, M. J. Assael, W. A. Wakeham – *Rev. Port. Quím.* **1981**, 23, 7-11. spq.pt/magazines/RPQuimica/303/987.
- [29] W. A. Wakeham, C. A. Nieto de Castro, "Technological Importance", Chapter 2 in J. Millat, J. H. Dymond, C. A. Nieto de Castro (eds.), "Transport Properties of Fluids – Their Correlation, Prediction and Estimation", Cambridge University Press, Londres, **1996**, pp 6-16. ISBN 0-521-46178-2.
- [30] C. A. Nieto de Castro, W. A. Wakeham, "Methodology", Chapter 3 in J. Millat, J. H. Dymond, C. A. Nieto de Castro (eds.), "Transport Properties of Fluids – Their Correlation, Prediction and Estimation", Cambridge University Press, Londres, **1996**, pp 17-26. ISBN 0-521-46178-2.
- [31] V. M. B. Nunes, M. J. V. Lourenço, F. J. V. Santos, C. A. Nieto de Castro, *J. Chem. Eng. Data* **2003**, 48, 446-450. DOI: 10.1021/je020160l.
- [32] J. M. P. França, C. A. Nieto de Castro, V. M. B. Nunes, M. L. S. M. Lopes, *J. Chem. Eng. Data* **2009**, 54, 2569-2575. DOI: 10.1021/je900107t.
- [33] V. M. B. Nunes, M. J. V. Lourenço, F. J. V. Santos, C. A. Nieto de Castro, *Appl. Energy* **2019**, 242, 1626-1633. DOI: 10.1016/j.apenergy.2019.03.190.
- [34] academic.oup.com/chemistry/people/info. php?pid=859426, academic.oup.com/chemistry/tree. php?pid=859426&pnodetcount=6&cnodetcount=2&fontsize=1 (Acedido em 06/05/2022).
- [35] web-genealogy.scs.illinois.edu/Info/nernsthw.pdf (acedido em 06/05/2022).
- [36] Artigo Eucken e en.wikipedia.org/wiki/Arnold_Eucken (acedido em 06/05/2022).
- [37] en.wikipedia.org/wiki/Klaus_Clusius (acedido em 06/05/2022).
- [38] J. C. G. Calado, *J. Chem. Thermodyn.* **1997**, 29, 247-252. DOI: 10.1006/jcht.1996.0160.
- [39] web-genealogy.scs.illinois.edu/Info/stromeyerf.pdf; en.wikipedia.org/wiki/Friedrich_Stromeyer (acedido em 06/05/2022).
- [40] web-genealogy.scs.illinois.edu/Info/bunsenrwe.pdf (acedido em 06/05/2022).
- [41] web-genealogy.scs.illinois.edu/Info/kolbeawh.pdf (acedido em 06/05/2022).
- [42] web-genealogy.scs.illinois.edu/Info/armstronghe.pdf (acedido em 06/05/2022).
- [43] web-genealogy.scs.illinois.edu/Info/lowrytm.pdf; en.wikipedia.org/wiki/Martin_Lowry (acedido em 06/05/2022).
- [44] C. A. Nieto de Castro, "Challenges for European science and technology – thermophysics of fluids and nanosystems", *Open Access Government* **2017**, novembro, 218-219. openaccessgovernment.org/open-access-government-november-2017/39524/ (acedido em 04/05/2022).
- [45] J. R. Filtz, J. Wu, C. Stacey, J. Hollandt, C. Monte. B. Hay, J. Hameury, M. A. Villamañan, E. Thurzo-Andras, S. Sarge, *Int. J. Thermophys.* **2015**, 36, 516-528. DOI: 10.1007/s10765-014-1807-x.

>

Carlos A. Nieto de Castro

Centro de Química Estrutural, Institute of Molecular Sciences, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. Professor Catedrático Jubilado da FCUL – Termodinâmica e Processos

de Transporte; Química Tecnológica; Química-Física; Coordenador do Grupo de Termofísica Molecular e Tecnologia de Fluidos do Centro de Química Estrutural da Universidade de Lisboa. Eng. Químico-Industrial – IST-UTL (1971); Doutor em

Ciências de Engenharia (Termodinâmica Química), IST-UTL (1977); Agregação em Química – FCUL, (1980). Fundador do Centro de Ciências Moleculares e Materiais, FCUL (1998-2014). Prémio de Estímulo à Excelência na Investigação, FCT-MCTES, Por-

tugal, 2005. Um dos 2% cientistas mais citados na área da Engenharia Química, subárea de Química-Física (*Stanford University Ranking*, EUA, 2020, 2021). cacastro@ciencias.uilisboa.pt ORCID.org/0000-0001-9011-5132