

**SOBRE O SURGIMENTO DA QUÍMICA TEÓRICA NO BRASIL\***

Myriam M. Segre de Giambiagi

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

Rua Dr. Xavier Sigaud 150,

22290-180 Rio de Janeiro, RJ, Brasil

(rio@cbpf.br)

\*Sobre uma palestra proferida na IV Semana do químico, 16–18 de junho 2003, Goiânia.

Peço desculpas pelo tom muito pessoal deste escrito, mas são experiências pessoais que ficaram ligadas a uma época muito especial de nossas vidas, que coincidiu com uma época muito especial da física brasileira e do próprio Brasil.

Sou ferrenha adversária da visão epistemológica reducionista de muitos físicos, que acreditam sinceramente que a química se explica através da física, a biologia através da química, portanto também da física e assim por diante. Devo a meu mestre Mario Bunge, com quem tive o privilégio de fazer um belíssimo curso de mecânica quântica, ter esclarecido essa idéia. Ele dizia que a física não se ocupa de problemas que preocupam os químicos (se bem um físico possa dividir a preocupação). Quando minha vida de física cruzou com a vida de químico de Mario, também nossas disciplinas cruzaram. Para o trabalho em comum que fizemos durante mais de 40 anos, nossas respectivas formações foram determinantes e conseguimos que dialogassem. Esse diálogo, por sua vez, foi ao mesmo tempo causa e consequência dos que conseguimos estabelecer com colegas que vinham da engenharia, da biologia, da matemática; e, claro, de outras especialidades da física e da química.

O Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas que nos acolheu em 1961 era multi-disciplinar no espírito, refletindo o clima que determinava a identidade da SBPC e a vitalidade da Academia de Ciências.

O Brasil também passava um período muito especial. Jânio Quadros acabava de assumir a presidência. Eu não entendia que o vice-presidente João Goulart podia ter sido eleito independentemente e por um outro partido. A arte e a ciência brasileiras formavam parte harmônica da cultura popular. As revistas que falavam do casamento “com véu e com grinalda” de Marta Rocha, continham também furiosas polêmicas científicas. Espantou-me ler nelas, nos primeiros dias de nossa chegada, uma discussão muito acalorada sobre o  $K^0$ , partícula que “pertencia” a Jayme Tiomno e era discutida por Cesar Lattes.

## **ANTES DO BRASIL**

Entrei à Faculdade de Ciências Exatas e Naturais da Universidade de Buenos Aires em 1954. Sempre digo que não foi por vocação que estudei física, mas por exclusão, minhas intenções tendo percorrido quase todas as carreiras possíveis fora da economia. Naquele ano vivia-se ainda na Argentina a primeira era peronista, segundo a tradição latino-americana os estudantes estávamos na primeira linha da oposição. A Faculdade onde estudamos foi, até 1962, o prédio histórico de onde se jogou azeite fervendo nos invasores ingleses em 1805. Havia um belíssimo pátio, em torno do qual estavam quase todas as salas de aula, onde se faziam as assembléias da resistência, sempre na presença de policiais à paisana fantasiados de policiais à paisana, como no musical Evita. A primeira paixão de minha vida foi por esse prédio, o pátio de nossas lembranças foi destruído pela ditadura militar de 76, que tinha horror dos estudantes entre outros ódios deles. Perón havia eliminado a prova para se entrar à Universidade; restabelecemos em fins de 1956, quando todos participamos de um mutirão para arregimentar estudantes com vocação. Eu me inscrevi para estudar física, nesse verão li um livro que quase me fez trocar pela biologia. Só no terceiro ano tive certeza que gostava mais da física e que da matemática, quando vi que os teoremas de existência me impacientavam. Mario havia se formado logo antes de eu entrar; na época peronista foi impossível ele continuar o doutorado, nos conhecemos vários anos mais tarde. Os dois pensávamos que nessa faculdade passaram-se os anos mais felizes de nossa vida, e que se tivéssemos feito uma outra das carreiras ali a nossa felicidade teria sido a mesma. Estudamos a poucos metros do núcleo histórico de Buenos Aires, no primeiro ano eu marquei aulas para sábado de tarde; após o laboratório de física geralmente íamos em grupo para o cinema ou o

teatro, no intervalo das aulas percorríamos os sebos de livros em torno e comprávamos maravilhas por tostões. As manifestações dos estudantes percorriam a Praça de Maio ou Florida. Depois da queda de Peron em 1955, quando os militares cederam aos estudantes a Universidade como reconhecimento pela resistência, na austera “Aula Magna” que também foi destruída após 1976 ouvimos Linus Pauling e Debye; os estudantes do segundo ano lotávamos o curso de quarto ano do matemático espanhol Julio Rey Pastor, não desejávamos perder a oportunidade de vê-lo e ouvir as esplêndidas aulas que ministrava, mesmo que não conseguíssemos acompanhar. A Argentina recebeu muitos intelectuais republicanos como ele; todos nós crescemos cantando as belas canções da guerra, e cantamos para os nossos filhos. Há bem pouco tempo, falando com jovens cientistas espanhóis, soube com espanto que para eles a guerra da Espanha é tão distante quanto a Idade Média.

Em 1956 incorporaram-se ao departamento de física vários jovens professores, alguns deles vindos de fora, como o irmão de Mario, JJ, que estava trabalhando no CBPF e voltou para Argentina, sendo professor do primeiro curso renovador que fiz na faculdade. Mario deu aulas privadas a minha irmã, mas eu só fui conhece-lo mais tarde, em 1958, quando JJ foi passar um ano na California junto com Gellman e Feynman. Quando Mario ia em minha casa dar essas aulas, eu estava na faculdade. A atividade política universitária sempre foi parte fundamental em nossas vidas, tanto quanto o estudo e o trabalho. Mario começou naquele ano a tese de doutorado com Simon Altmann (quem, após fazer que a Universidade de Buenos Aires comprasse o computador Mercury como o que ele usava em Oxford no grupo de Coulson, não conseguiu se re-adaptar ao sub-desenvolvimento e voltou para Inglaterra) e acabou em 1960 com Norah V. Cohan, quem também vinha de Oxford mas ficou. Mario fez a tese sem computador, que chegou bem mais tarde.

Nosso namoro começou quando eu completei 21 anos e começava a trabalhar em Mecânica Estatística com nosso mestre Félix Cernuschi. Ajudei Mario com as contas da tese, passávamos fins de semana na Faculdade. Usávamos tabelas de funções exponenciais e de coeficientes de interpolação. Curiosa, li alguns dos artigos que ele me indicou e aprendi um pouquinho de teoria de grupos, fundamental para os químicos e que os físicos desconhecíamos. Aprendi a calcular raízes quadradas cortando a série de Taylor e repetindo até obter a precisão desejada. O trabalho a dois ficava mais divertido, após um certo treinamento as raízes quadradas com oito casas decimais levavam apenas 2 a 4 minutos.

Quando Mario acabou a tese, foi trabalhar comigo e Cernuschi. Fazendo contas para um trabalho em teoria de soluções, apareceu uma integral elíptica. Consultando com os excelentes matemáticos de Buenos Aires, foi nos sugerido entrar em contato com os primeiros colegas que tinham entrado para a IBM. Foi ali que aprendemos a programar em Fortran para uma IBM 650.

## **DESBRAVANDO CAMINHOS**

No entanto, JJ fez uma viagem para Rio, e falou com Jacques Danon da tese em química teórica. Jacques pediu a tese, achou interessante e convidou Mario para passar um tempo no CBPF; Ricardo Ferreira, proveniente do Caltech onde teve a felicidade de conviver com Linus Pauling, havia sido nomeado professor. Mario aceitou, disse que ia casar comigo, que eu era física mas não se preocupasse comigo. Jacques mandou parabéns e em 24 de abril de 1961 chegamos de navio ao Rio. Dois dias depois, completei 24 anos e me tornei “penetra” no CBPF, onde o diretor era Leite Lopes. Ninguém me tratou como tal e me senti logo totalmente à vontade. Mario recebia parte do salário pelo CBPF e parte pela CAPES. Eu trabalhava de graça com o maior entusiasmo.

Jacques Danon nos levou à CAPES conhecer Almir de Castro, diretor da CAPES. Recebeu ali um cheque de pagamento adiantado, sem assinar nada. Jacques disse que procurássemos apartamento sem pressa. Mario e eu compramos cadernos e jornais e acabamos alugando em Toneleros 186, por acaso ao lado de Danon. Como nos disseram todos, do outro lado foi o atentado a Lacerda que levou ao suicídio de Getúlio. Muitas vezes voltávamos andando do CBPF, subindo a ladeira do Túnel Novo e descendo na Praça Cardeal Arcoverde. Cruzávamos com mulheres da favela com a lata de água na cabeça e o porte de rainhas que a carga lhes dava. Nessas procuras de apartamento visitamos 120 em Copacabana, que portanto conhecemos por dentro. Quando dizíamos que trabalhávamos no CBPF, não era infreqüente o comentário “Ah, é onde trabalha César Lattes”, referência mais importante que um fiador. O fato de ser cientistas era prestigioso! Não conseguíamos imaginar um comentário equivalente em Buenos Aires.

O apartamento não tinha telefone, em troca dava para as árvores do morro. Toneleros era uma rua tranqüila, podíamos dormir de janela aberta olhando para as árvores e com absoluta privacidade. Claro que íamos muito à praia, de vez em quando voltávamos na hora do almoço, comíamos um abacaxi na areia e íamos trabalhar outra vez.

Nesse apartamento de Toneleros, um quarto e sala, não havia quarto de empregada mas constava um pequeno banheiro para ela. Só tinha vaso e chuveiro, o que achamos escandaloso; logo acrescentamos um lavabo. Veio instalá-lo, indicado pelo porteiro, um senhor preto, esguio e elegante. Era bombeiro de algum círculo militar e discutia política com os militares, havia lido “Petróleo y Política”, livro de Arturo Frondizi, que era o presidente argentino. Isso também era impensável em Buenos Aires onde, apesar da tão falada politização geral, um bombeiro não era informado a esse ponto sobre a situação de nenhum outro país da América Latina; podia, sim, saber bastante sobre Europa.

Em um dos carnavais em que assistimos às escolas de samba, passando a noite inteira nas arquibancadas da Presidente Vargas, Portinari tinha a ver com um dos enredos.

Devo confessar, como carioca adotiva que eu sou, que minha primeira impressão do Rio foi de decepção (Mario já conhecia Rio e o CBPF, de quando veio visitar o irmão). Não tinha a menor idéia de como era e devia esperar, sei lá, uma praia de coqueiros que Rio não tinha. Antes de vir, tinha lido “Gabriela” em português, sem muita dificuldade; chegando, descobri que para me entender com as pessoas precisava aprender com urgência um vocabulário básico e comprei um pequeno manual de conversação inglês-português porque foi o que achei na livraria do Copacabana Palace, está em casa até agora. Minha ignorância do português era tão grande e a informalidade comparada à argentina também, que pensei que “você” era equivalente ao “you” em inglês, nem tinha percebido esse negócio de “o senhor” e “a senhora”; eu parecia mais jovem do que era, ninguém me dizia “a senhora”. Então eu tratava Guido Beck de “você”, como todos se tratavam no CBPF, e ninguém me chamou a atenção sobre isso.

Ricardo havia proposto uma parametrização para os elementos diagonais da Hamiltoniana molecular, nós bolamos uma outra que achamos consistente para os elementos não diagonais. No prédio velho do CBPF, onde hoje estão o IBICT e o CLAF (Centro Latino Americano de Física), o grupo de pessoas que ali trabalhavam era pequeno, todos discutíamos com todos, os seminários eram muito vivos e cheios de perguntas; chegados do ambiente extremamente acadêmico de Buenos Aires, onde “não ficava bem” admitir não dominar um argumento, ficamos apaixonados pela liberdade no ambiente. Havia bem pouco tempo que eu me tinha formado, no entanto era tratada de igual para igual por todos esses cientistas que haviam trabalhado com os grandes nomes da física e falavam disso com toda naturalidade. Eu sou a

única pessoa em Buenos Aires a ter-se formado em Física Teórica, como não tinha a preocupação do título fiz algumas matérias de doutorado antes de completar o bacharelado e também a última prova (sempre detestei provas, mesmo como professora) dois dias antes de casar e viajar, para não pensar mais nisso. Mal tinha começado a trabalhar, enquanto estava no Rio meu primeiro trabalho, com Cernuschi e o único que fiz sem Mario, foi publicado no J. Chem. Phys..

Anos mais tarde, Darci Ribeiro me fazia repetir que a nossa experiência no CBPF foi para nós muitíssimo mais formativa que a alternativa de fazer o primeiro trabalho no exterior na Europa ou nos Estados Unidos. Outra coisa que nos maravilhou era como os brasileiros lidavam com as revistas. Eu tinha pego uma revista científica pela primeira vez quando encontrei Cernuschi. Em Buenos Aires usávamos muito os livros, ficávamos horas estudando na biblioteca da faculdade e tomando notas, mas as revistas estavam num outro planeta para os estudantes. Os brasileiros liam um artigo alheio à especialidade deles e percebiam de uma olhada se era ou não relevante, e podiam exprimir em poucas palavras com que lidava a escrita. Danon, particularmente, tinha uma inteligência especial para isso. Uma discussão com ele era sempre utilíssima.

Ninguém sabia o que era a burocracia. Até um ponto muito significativo. Tivemos que ir ao consulado argentino renovar alguma coisa. Como casamos e viemos logo para aqui, os documentos argentinos tirados uns dias antes eram documentos de solteiros. Mario não teve problemas mas eu, para as leis argentinas... não era mais eu porque tinha mudado de nome (o sobrenome de casada nos documentos argentinos, com o possessivo machista “de”, deixou de ser obrigatório há bem pouco tempo). Mostramos logo a carteira de casamento, que é o que davam solenemente na hora de casar com o espaço para se inscrever os muitos filhos esperados como resultado do ritual. O cônsul nos disse que isso não era um documento.



Perguntamos perplexos para que é que davam, a resposta foi “para que as senhoras fiquem contentes” (sem comentários). Bem, em resumo, tivemos que mandar pedir em Buenos Aires uma certidão de casamento, autenticar, carimbar e...esperar bastante. No intervalo, eu tinha deixado de existir, a sensação foi desagradável. Voltando ao CBPF, ninguém entendia. Marlene, a secretária mais eficiente que já passou pelo CBPF (comentário de Henrique Lins de Barros, “se a gente explica, ela poderia escrever os nossos trabalhos diretamente em inglês sem precisar corrigi-los”) disse logo “aqui deve se acrescentar ‘de Giambiagi’? Eu faço”; tive que tirar apavorada meu passaporte da mão dela, não entendeu meu espanto, falava sério. Houve uma outra história. Mario precisou de uma fotocópia do diploma, que por sua vez era uma dessas antigas, em branco sobre preto. Fomos em uma loja de fotografia e perguntamos se iam conseguir tirar, nos responderam que veriam. Quando Mario foi buscá-la, a moça disse “fiz o melhor possível”. Olhando em casa com mais cuidado, vimos que ela tinha decalcado a fotocópia e depois fotocopiado esse trabalho, que deve ter levado um bocado de tempo. Cobrou como uma fotocópia comum. Era um trabalho primoroso, só o carimbo da Universidade de Buenos Aires estava mais estranho do que devia. Guardo ainda esse documento histórico.

Decidimos testar os parâmetros através de um cálculo para a piridina (então o teste usual), claro que  $\pi$ . Ricardo já tinha usado as cargas nucleares efetivas de Kohlrausch [1], muito pouco conhecidas, para calcular o momento dipolar das ligações  $\sigma$  através do método de igualização das eletronegatividades [2]. Guido Beck, com quem comentamos que íamos usá-las, nos disse que Kohlrausch havia sido professor dele. As fórmulas de Roothaan [3] para as

integrais de recobrimento levavam a resultados bem maiores que os usuais com as cargas de Slater [4]; fomos então obrigados a considerar todos eles, complicando bastante o trabalho.

Com um livro de cálculo numérico, fizemos inversão, autovalores e autovetores de matrizes. Verificávamos todas as contas, discutíamos com Ricardo os resultados obtidos. Era crucial aproveitar a simetria da molécula para simplificar a tarefa. Os sistemas de 6 equações e 6 incógnitas para a piridina se reduziam a um de 4 e um outro de 2, mudava tudo. Passaram-se apenas 40 anos dessa pré-história. Usávamos máquinas de calcular que faziam muito barulho. Nem a USP possuía ainda um computador. Quando soubemos que ali existia um modelo de máquina Friden com uma TECLA para raiz quadrada, fomos roídos pela inveja de tanto avanço. Em algumas semanas, tínhamos os resultados preliminares para a piridina, que nos estimularam.

Na aproximação  $\pi$ , a noção de sistema alternante [5] era muito importante. Contamos para os físicos teóricos que estávamos lidando com um sistema alternante, em discussões tipicamente interdisciplinares. Samuel MacDowell (com quem mais tarde fizemos um trabalho em Buenos Aires e foi depois para Yale) gostou da noção. Nos incomodava que as ordens de ligação fossem negativas para átomos vizinhos e Samuel nos sugeriu uma maneira que nós achamos muito brasileira de driblar o problema, trocando nas funções de onda o sinal das funções de base de um dos conjuntos, nos assegurando que era totalmente legítimo.

Vários anos depois conseguimos entender por quê acontecia isso [6], estando relacionado com uma inversão na ordem obtida para os níveis de energia. Embora usualmente a função de onda  $\pi$  correspondente ao nível de energia mais baixo não apresentava nós, e a ordem de baixo para cima era de nenhum nó para 1, 2, ..., nossos resultados eram exatamente opostos. Roald Hoffmann havia mencionado essa possibilidade no primeiro trabalho de seu método

EH [7]. Não lembro em qual ano, mas foi antes de 66, Cotton estava em Buenos Aires e fomos discutir com ele essa dúvida. Cotton, após pensar um pouco, nos disse que a ordem crescente dos nós para as funções de onda baseava-se no modelo do elétron numa caixa, portanto ele não via nenhuma objeção fundamental à nossa inversão.

A ciência não estava ainda globalizada, a ciência brasileira tinha identidade, como tinham a ciência inglesa, a francesa, a italiana, cada uma de estilo perfeitamente distinguível.

Nossos horários argentinos eram mais noturnos, reclamamos no CBPF que a biblioteca (onde, por sinal, os funcionários eram de uma competência inacreditável) fechava cedo demais. Acabaram nos dando uma chave da biblioteca para poder usá-la à noite ou os fins de semana, à vontade. A palavra “xerox” não existia, existiam as fotocópias, muitas delas em branco sobre preto. Quando tomávamos breves notas do que nos interessava de um artigo, não tínhamos noção de que nossa atitude era ecológica, o papel não fazia pilhas e pilhas a reciclar se possível, no máximo virava papel para rascunho; e como fazíamos rascunho, em nossos cálculos manuais!

Veio a renúncia de Jânio. Foi ali que nos integramos definitivamente com a comunidade do CBPF. Ficávamos com os colegas acompanhando pelo rádio os pronunciamentos de Brizola, os deslocamentos do exército (título da época no Correio da Manhã, o jornal que mais líamos: “O primeiro exército está marchando sobre o segundo; felizmente ainda não se encontraram”). Fomos convidados às reuniões na casa de Gabriel Fialho, onde encontramos pela primeira vez o nosso grandíssimo amigo Haity Moussatché. Haroldo Oest, Chefe da Divisão de Material no CBPF, nos falava dos irmãos generais; uns anos mais tarde conhecemos o general Henrique no exílio em Montevideú. Para nós argentinos, acostumados às nossas forças armadas de mentalidade nazista, como infelizmente a história nos confirmou, era absolutamente

incompreensível que existissem generais que se declaravam comunistas (e o partido comunista estava fora da lei!). Muito depois soubemos que o Gabriel foi para o Sul incorporar-se ao movimento legalista. Pouco tempo antes, havíamos conhecido Portinari e, na inauguração de sua exposição na Galeria Bonino, Niemeyer e Prestes, que estava com Anita.

Mais ou menos nessa época fiquei grávida, passei muito mal e sem poder trabalhar uns dois meses. Quando voltei para o CBPF, o comentário sobre minha gravidez era um sincero e caloroso “que beleza!”. Todos entenderam que era nossa homenagem ao Brasil.

O nosso programa de trabalho com Ricardo era muito ambicioso, queríamos calcular todas as azinas monocíclicas, isto é 10 problemas de 6 elétrons  $\pi$  cada. Pior, na nossa desvairada ambição queríamos chegar a cálculos com até 14 elétrons. Alfredo Marques, físico nuclear, nos contou que o IBGE tinha um computador poderosíssimo, e o CBPF tinha acesso a ele. Era um UNIVAC 1105, muito mais que o IBM 650 para o qual havíamos programado em Buenos Aires; a linguagem dele, o UNICODE, ele não era muito diferente do Fortran que conhecíamos.

Usava fitas perfuradas no lugar dos cartões, mas alguém faria esse trabalho para nós. Logo aprendemos que, para mudar alguma instrução no programa, era bom deixar pedaços de fita sem perfurar para poder cortar e emendar com durex. Em pouco tempo, levávamos para casa rolos de fitas coloridas muito alegres, parecendo serpentinas.

Havia um porém, na verdade mais de um...O monstro não trazia na bagagem nenhuma subrotina além de funções trigonométricas, potenciação e pouco mais. Também não havia ninguém a quem perguntar as muitas dúvidas. A ajuda de Alfredo foi inestimável, Erasmo Ferreira nos passou um algoritmo de determinante. Ficamos perplexos quando uma integral de

recobrimento, para a qual o nosso resultado era 0,49, no computador deu 0,51, sendo uma fórmula simples. O engenheiro eletrônico americano que se ocupava das válvulas do computador, nos disse que a exponencial dele tinha 10 casas decimais e nós tínhamos feito as contas com 8 casas. Desconfiados, refizemos com 10 casas decimais e não é que apareceu o 0,51? Aprendemos muitíssimo fazendo as contas e nossos programas!! O cálculo preliminar foi utilíssimo... para verificar o programa.

Ninguém nos explicou direito para que o IBGE havia comprado esse computador, às vezes tínhamos a suspeita que ninguém sabia muito bem o que fazer com ele. Para o censo, o IBGE já possuía outro, mais adequado. O 1105 parecia mesmo feito para computação científica, mas qual? Com certeza não a do CBPF. Corria um boato que valia um milhão de dólares (era muito, muito dinheiro em 1961), mas o Brasil tinha pagado três milhões. Chegamos a ver esse computador ser alugado para tirar as notas médias de uma escola, que pagou tal trabalho ao IBGE. Sem comentários.

Quando o resultado do programa foi igual àquele que havíamos obtido na máquina de calcular, fizemos uma festa no IBGE. Pensaram que o trabalho tinha acabado, Alfredo esclareceu que estávamos apenas em condições de começa-lo, porque existiam muitas moléculas à nossa espera para ser desvendadas.

Nosso estardalhaço em torno das moléculas fez com que nos cedessem uma hora de computador todos os dias de Segunda a Sexta-feira. Toda, todinha uma hora para nossos sistemas, de 18 a 19 horas, até um horário bem camarada. Íamos poder calcular todos os sistemas em pouquíssimo tempo! Escrevemos depois que um problema de 6 elétrons teria requerido 45 horas de nosso trabalho a dois na máquina de calcular, supondo que não se cometessem erros. No computador levava 22 minutos. Parece fantástico? Não era. O monstro calculava em 30 segundos, o resto do tempo era para a impressão dos resultados, não porque

essa impressão fosse de um volume absurdo, mas porque absurda era a saída...impressa, ou melhor escrita em uma máquina de escrever comum. Em abril de 1962, no Boletim do Processamento de Dados do IBGE, ano 1, Nº 3, publicamos, em espanhol, possivelmente o primeiro trabalho em química computacional feito no Brasil. O Boletim era impresso em um papel amarelado, de uma pobreza franciscana.

Voltemos à nossa hora diária de devaneio computacional; às 18 horas o computador, que devia estar com vontade de ir jantar, costumava recusar-se a funcionar sem ar condicionado que, por sua vez, respeitava bastante esse horário de expediente. De nenhuma maneira era intencional, simplesmente era a realidade. Às vezes ele (era inevitável estabelecer uma relação pessoal com o computador, apesar de seu aspecto imponente) esquecia do horário e adiantávamos muito. Quando ficávamos trabalhando no horário de almoço, gostávamos de comer alguma coisa no bar da Produção Mineral, um cantinho simpático contra a pedra do morro. Levamos um susto um dia, quando apareceu uma cobra e logo alguém berrou “coitado do bichinho! Não mata ele”. O bichinho nos pareceu de tamanho respeitável, e a presença dele inoportuna, mas eu saí de fininho sem reclamar, já estava aprendendo regras elementares de convivência à brasileira.

O computador ficou uma vez parado vários dias, à espera de válvulas que deveriam ser importadas e estavam demorando. Nossa fonte de boatos contou, depois que o problema foi contornado, que segundo a alfândega as válvulas já tinham passado: alguma personagem influente havia “importado” um aparelho de som declarado como sendo as tais válvulas que o IBGE esperava em vão.

O UNIVAC era também sensível aos sucessos que convulsionavam o Brasil. Não estou falando na renúncia de Jânio, mas desta vez no mundial de futebol que, claro, emocionava até

o computador. No jogo em que Brasil começou perdendo com a Espanha, ele voltou a funcionar aliviado só após a pátria ser salva.

Estava para ser fundada a Universidade de Brasília. Veio ao CBPF, por poucos dias, Harrison Shull. Ricardo iria mais tarde trabalhar na Universidade de Indiana, convidado por ele, quem por sua vez não tinha ainda fundado o banco de programas QCPE (Quantum Chemistry Program Exchange). Toda a comunidade internacional depositava ali os programas de química quântica, editava-se um boletim e, em troca de um pagamento muito baixo (chegamos a pagar de nosso bolso, de volta em Buenos Aires, os programas que precisávamos) para que o sistema fosse sustentável, fazia a distribuição. Recebiam-se pelo correio as caixas com os cartões perfurados, junto com um manual muito claro contendo instruções, exemplos, advertências sobre limitações (tamanho das moléculas e natureza dos átomos parametrizados) e aplicabilidade. Em geral, eram bastante testados antes de ser submetidos ao uso alheio. O indecente sistema comercial atual é muito recente, o boletim do QCPE publicou veementes protestos no início.

Em um seminário no CBPF, Shull falava com orgulho no IBM 730 que ia ganhar breve. Alguém lhe ofereceu, sem dar muita importância, mostrar o computador a que nós tínhamos acesso. Fomos com ele, que ficou de queixo caído: “mas...esse é muito mais poderoso que meu futuro computador”. Decidimos poupa-lo da outra parte da história, para deixa-lo com a impressão da superioridade brasileira.

Além de utilizar todos os recobrimentos, tivemos a curiosidade de calcular todas as ordens de ligação, mesmo para os átomos não adjacentes. Ainda agora, é pouquíssimo usual fazer-lo para os índices adequados, em cálculos que ultrapassaram, há muito tempo, a aproximação  $\pi$ . Um trabalho de Coulson [8], contendo uma abordagem extremamente original do problema

em bases não ortogonais (isto é, com recobrimento), foi para nós fonte de inspiração de muitos outros trabalhos ao longo dos anos. Sempre nos surpreendeu que a importância dele não seja reconhecida. Usava conceitos do cálculo tensorial sem a notação adequada. Muitos jovens não sabem que Coulson era matemático, seu livro “Valence” requer uma bagagem matemática mínima, sublinhando a profundidade conceitual do autor. A revisão que dele fez Mc Weeny é um livro diferente, não uma atualização; McWeeny incorporou muito justamente seu nome [9].

Nesse trabalho, menciona-se que, se as matrizes da Hamiltoniana  $\mathbf{H}$  e dos recobrimentos  $\mathbf{S}$  comutam, então os cálculos com e sem recobrimento devem levar ao mesmo resultado para densidades eletrônicas e ordens de ligação. No trabalho sobre a piridina calculamos o comutador  $[\mathbf{H}, \mathbf{S}]$  e especulamos sobre ele. Após voltar para Buenos Aires, Samuel MacDowell passou um tempo na nossa faculdade e fizemos juntos um trabalho sobre esse tema, que publicamos no Nuovo Cimento [10].

Ninguém nos cobrava o resultado do trabalho, que redigimos sem pressa e com muita alegria. Ricardo voltou para Recife e nós para Buenos Aires, deixando ele pronto mas também sem urgência para publicar. Concordamos em fazê-lo no Journal de Chimie Physique (revista que publicou muitos dos trabalhos fundamentais da química teórica), em francês. Tivemos a triste honra de publicar o último trabalho em francês de THEOCHEM. Por muitos anos publicamos de vez em quando em francês, como forma de protesto contra a ditadura do inglês como única língua para a ciência.

Em 1962, foi fundado o Centro Latino Americano de Física. Leite Lopes era diretor do CBPF, Gabriel Fialho foi ser diretor do CLAF. O salário de Mario tinha sido corroído pela inflação, estava para nascer nosso filho e me tornei a primeira bolsista do CLAF. Por isso brinco dizendo que na verdade nosso filho Fabio foi o primeiro bolsista do CLAF. Na volta,



escrevemos para Gabriel Fialho, agradecendo e comentando a importância de um computador para o nosso trabalho; foi por nossa sugestão que o CBPF acabou ganhando um IBM 1620, comprado em 1964, que chegou em 1966. Estávamos para voltar em Buenos Aires logo após o nascimento de Fabio, quando um dia Mario voltou do CBPF dizendo “Myriam, Gabriel diz que como vamos voltar para essa terra dos gorilas (tinha havido o golpe contra Frondizi, o dia dos três presidentes não é novidade na Argentina), que fiquemos”. Demorei um minuto para decidir que claro que eu queria ficar em Rio e no CBPF. A burocracia foi assim: Fialho disse a Nelson Lins de Barros (irmão de João Alberto, que foi ministro de Getúlio; Nelson era compositor de sambas, parceiro de Carlinhos Lyra, e nos levava ao terreiro de Mangueira, por isso nós somos todos mangueirenses; um outro irmão, British, pai de Henrique, foi um dos fundadores do CBPF, mas essa é uma outra história) “Nelson! Mario e Myriam ficam”. Fomos um mês de férias em Buenos Aires para mostrar o filhote à família e voltar, muito felizes, para Rio. Sempre de navio, que era muito mais barato que o avião. Sem um papel nem assinatura no meio.

Em inícios de 63, levamos de volta para Buenos Aires uma pilha grande de resultados de computador, material que exploramos em vários trabalhos nos anos seguintes (o ritmo era muito diferente do atual). Publicamos ainda no J. Chim. Phys. (1967) um trabalho sobre as outras azinas monocíclicas, e em Theoret. Chim. Acta (1967) um com as polarizabilidades de Chirgwin e Coulson. No entanto, os nossos países sofriam com o golpe de 64 em Brasil e o de 66 na Argentina, onde havíamos ficado desempregados.

Ainda tínhamos passado um mês em Rio em fevereiro de 1964. O navio partiu nos dias anteriores ao comício na Central do Brasil; não acreditávamos que pudesse ter golpe e muito menos que fosse para ficar. Chegando, fomos para um apartamento muito simpático e agradável que o CLAF tinha na rua Domingos Ferreira. No “Edifício Master”, que Eduardo

Coutinho celebrizou de outra maneira. Porém, faltava água, e acabamos indo para a casa de Nelson, que ele nos emprestou enquanto viajava.

Fomos conhecer Berta e Darcy Ribeiro em Montevideu, no exílio. Brincávamos que a gente tinha um mês de exílio mais do que eles. Fomos com frequência visita-los, trazendo às vezes correspondência para fazer chegar ao Brasil. Na casa deles conhecemos todos os exilados de Montevideu. Em uma dessas visitas, falou-se que Lacerda tinha brigado com os chefes do golpe que ele ajudou a dar e ia se exilar no Uruguay; Berta falou a frase mais dura que já ouvi dela, “se ele vier, vamos fazer um gelo em torno dele”. Em 1968 quando, em um outro exílio após o golpe de Ongania na Argentina, tivemos que ir para Itália, Berta foi nos ver ao porto em Montevideu. Em Roma, recebemos dela uma carta muito alegre: “vocês estão exilados, porém nós já não, estamos voltando para o Brasil!”. Voltamos da Itália em novembro, sempre de navio. Na escala em Rio, fomos para a casa de Leite, onde ele e Maria Laura nos receberam junto com Haity e sua esposa Cadem. Falamos pelo telefone com Darcy e Berta. Darcy nos disse “é só vocês descerem a bagagem do navio e ficar”. Um mês após a nossa chegada, o AI5 se abateu em cima de nossos amigos. Nelson já tinha morrido em 1966. Gabriel não estava no Brasil.

Com o AI5, apagamos Brasil no nosso coração (nesses anos, foi oferecido a Mario um trabalho pela Unesco e recusamos). Ficávamos sempre a par do que acontecia nestas terras e em contato com os muitos amigos brasileiros dentro e fora do Brasil. Para fins de 1974, a situação argentina não estava certamente melhor que a brasileira. Decidimos passar no Brasil as férias escolares dos filhos de inícios de 1975, e Ricardo nos convidou generosamente para fazê-lo em Recife, que não conhecíamos. Antes tínhamos consultado com os amigos exilados se concordavam e nos insistiram muito calorosamente que aceitássemos. Almino Affonso estava exilado em Buenos Aires e discutimos isso com ele. Um ano e meio mais tarde,

tivemos que nos exilar de vez quando fomos cassados. Fomos outra vez para Recife, após falar novamente com Ricardo. Transcorreram apenas 30 dias entre a decisão de sair e nossa viagem. Apesar de tudo, a burocracia brasileira não tinha ainda piorado tanto. Outros tiveram que sair muito mais depressa. Outros não fizeram em tempo. Em março de 1977, voltamos para o CBPF, para nossa casa.

Nesse ínterim, a química teórica tinha se desenvolvido, tendo grupos em várias universidades brasileiras. Em 1980, realizou-se no CBPF o primeiro Simpósio Brasileiro de Química Teórica, organizado por Marco Antônio Chaer Nascimento e Diana Guenzburger. Haviam convidado o nosso velho conhecido Massimo Simonetta. Em 1988, também no CBPF, organizamos com colegas brasileiros uma Escola Latino Americana de Química Teórica, a única feita no Brasil.

## **UM ESTILO, UMA ÉPOCA**

Nos anos 60, a literatura científica tinha um outro estilo literário. Nem preciso acrescentar que muito mais prazeroso de ler. Na verdade, o estilo literário já não existe. Recomendo calorosamente aos jovens que leiam um par de trabalhos, clássicos também do ponto de vista literário. A obrigatoriedade do inglês, língua pouco familiar à maioria dos autores científicos, tem piorado demais a qualidade dos textos técnicos. Os trabalhos de Coulson, e o livro *Valence*, são muito bem escritos. Veja-se *The physical Nature fo the Chemical Bond*, de Ruedenberg [11]; é um texto primoroso de 50 páginas, com uma reflexão muito especial sobre a natureza da energia de troca sobre a qual preferiria manter o suspense para estimular a sua leitura. Roald Hoffmann, que além de ser cientista publica também poesias, pôde se dar ao luxo de escrever de maneira diferente por ser Prêmio Nobel; mas um belo trabalho em estilo pouco usual para 1978 é anterior [12]. O estilo de Dewar é também pessoal.

Vou dar só um exemplo de estilo brasileiro de fazer ciência, , através do trabalho que Ricardo publicou em 1968. O título, *Is One Electron Less Than Half What An Electron Pair Is?*. O trabalho, muito conceptual, é uma *Letter* de uma página. Apesar disso, nem passou pela cabeça do *referee* pedir que tirasse o comentário final, que vou reproduzir.

*Bertrand Russell says of S. Webb that before his marriage he was much less than half of what the Webb couple afterwards became. From a molecular standpoint, it is equally correct to say that one electron is less than half what an electron pair is.*

Foi nos entendendo nesses termos que fizemos com Ricardo, quando voltamos para o Brasil em 1976, um trabalho nos divertindo em passar pedacinhos de pares de elétrons de um nível para outro [14], explorando a idéia de Dewar quando propôs tratar os problemas de camadas abertas como sendo de camadas fechadas tendo dois meio-elétrons [15]. Idéia fora de moda? Nem tanto, está incorporada ao programa MOPAC.

Em um trabalho que fizemos com o colega Paulo Pitanga, que em geral trata um outro tipo de problemas, muito mais matemáticos, eu queria escrever no título que era um “pseudo-problema”, expressão que Mario vetou. Na hora da redação, as discussões profissionais pegavam fogo, se transformando em conjugais, nossos estilos literários sendo muitíssimo diferentes. Acabou sendo o para mim insosso *Remarks about the definition of a bond index*, um *paper* que pouquíssimas pessoas estavam em condições de apreciar [16]. Consegui, com muita dificuldade, que Mario me permitisse acabar com a frase *Perhaps we could say that there has been ‘much ado about nothing’*. O *referee* gostou, o comentário foi *I agree with the authors’ final comment, please publish!* Foi das poucas vezes que recebemos um comentário personalizado.

O nefando critério numerológico para “medir” a “produtividade” científica tem levado à uma queda dramática na qualidade de redação (falar em literária para estes textos é até

irônico) do que as revistas publicam. Os próprios editores desistiram de pedir um inglês aceitável na maioria deles. Já perceberam como é ruim o dos autores japoneses, inclusive o de boa parte dos russos, apesar do evidente esforço cultural de respeito à língua? A palavra “produtividade” não faz o menor sentido em ciência, posto que não pode existir um padrão de medida; trabalhamos em um sistema sem métrica, desejo lembrar que a métrica no espaço de Hilbert das funções de onda é a matriz de recobrimento, seria interessante fazer um trabalho sobre a escolha do sistema de funções de base adequadas para uma medida da ciência.

A revista *Nature* tem publicado recentemente uma série de cartas sobre este problema, cada vez mais urgente. Para “fazer número”, publica-se de forma cada vez mais fragmentada, o que torna freqüentemente ilegível um artigo. A forma pode lembrar uma parodia, que um colega uma vez mostrou em Recife e não voltei a ver, sobre como tornar menos trivial  $1+1=2$ , com trigonometria, exponenciais e tais. Em uma destas cartas recentes acena-se com uma possibilidade de solução. A difusão dos trabalhos na Internet poderia permitir que se destinasse à difusão em papel uma forma mais abrangente, pensada a longo prazo. Acredito que a ecologia obrigará a decisões nesse sentido. O nosso papel como intelectuais e cientistas deve ser pensar o futuro. Com seriedade e alegria.

## **REFERÊNCIAS**

- [1] K.W.F. Kohlrausch, *Acta Phys. Austriaca*, 3, 452 (1949).
- [2] R.C. Ferreira, *J. Phys. Chem.* 63, 745 (1959).
- [3] C.C.J. Roothaan, *J. Chem. Phys.* 19, 1448 (1951).
- [4] J.C. Slater, *Phys. Rev.* 36, 57 (1930).
- [5] ver por exemplo R. Pauncz, “*Alternant Molecular orbital Method*”, W.B. Saunders, 1967.
- [6] R. Carbó, M.S. de Giambiagi, M. Giambiagi, *Nvo. Cim. Serie X*, 59B, 204 (1969).

- [7] R. Hoffmann, J. Chem. Phys. 39, 1397 (1963).
- [8] B.H. Chirgwin e C.A. Coulson, Proc. Roy. Soc. A201, 196 (1950).
- [9] R. McWeeny, *Coulson's Valence*.
- [10] S. MacDowell, M.S. de Giambiagi, M. Giambiagi, Nvo. Cim., 35, 410 (1965).
- [11] K. Ruedenberg, Rev. Mod. Phys. 34, 326 (1962).
- [12] P.K. Mehrotra, R. Hoffmann, Theoret. Chim. Acta 48, 301 (1978).
- [13] R. Ferreira, J. Chem. Phys. 49, 2456 (1968).
- [14] M.S. de Giambiagi, M. Giambiagi, R. Ferreira, Chem. Phys. Lett. 52, 80 (1977)
- [15] M.J.S. Dewar, J.A. Harshmall, C.G. Venier, J. Am. Chem. Soc. 90, 1953 (1968).
- [16] M.S. de Giambiagi, M. Giambiagi, P. Pitanga, Chem. Phys. Lett. 129, 367 (1986).