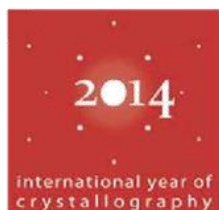




United Nations
Educational, Scientific and
Cultural Organization



International
Union of
Crystallography




Partners for the International Year of Crystallography 2014

Cristalografia e aplicações: no íntimo da matéria



Ano Internacional da Cristalografia 2014





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

© UNESCO 2013
Todos os direitos reservados

Título original: Cristalografia e aplicações: no íntimo da matéria!

Coordenador/editor: Susan Schneegans

Fotos Capa: Avião © Shutterstock / IM_photo; Scientist in Africa @ FAO

Composto e impresso
nas oficinas da UNESCO

A impressora é certificada IMPRIM'VERT[®],
iniciativa ambiental da indústria gráfica francesa.

Impresso na França

SC-2013/WS/9
CLD 1.251,13

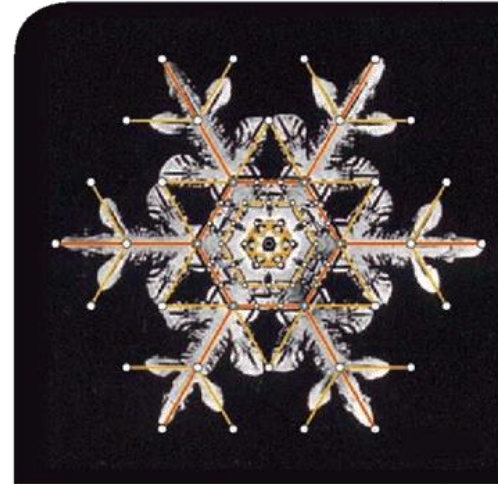
O que é Cristalografia?

Os cristais podem ser encontrados em toda a natureza. Eles são particularmente abundantes em formações rochosas como os minerais (pedras preciosas, grafite etc), mas também podem ser encontrados em outros lugares, sendo exemplos os flocos de neve, gelo e grãos de sal. Desde os tempos antigos, os estudiosos têm ficado intrigados com a beleza dos cristais, a sua forma simétrica e variedade de cores. Os cristalógrafos usaram a geometria para estudar a forma de cristais no mundo natural.

No início do século 20, percebeu-se que os raios-X poderiam ser usados para "ver" a estrutura da matéria de forma não invasiva. Isto marca o alvorecer da moderna cristalografia. Os raios-X foram descobertos em 1895. Eles são feixes de luz que não são visíveis ao olho humano. Quando os raios-X atingem um objeto, átomos do objeto espalham-se. Cristalógrafos descobriram que os cristais, devido ao seu arranjo regular de átomos, dispersam os raios em apenas algumas direções específicas. Ao medir essas direções e a intensidade dos feixes espalhados, cientistas foram capazes de produzir uma imagem tridimensional da estrutura atômica do cristal. Cristais foram escolhidos como materiais ideais para estudar a estrutura da matéria em nível atômico ou molecular, por conta de três características comuns: são sólidos, tridimensionais e construídos a partir de arranjos dos átomos regulares e frequentemente simétricos.

Graças à cristalografia de raios-X, os cientistas podem estudar as ligações químicas que atraem um átomo para outro. Tome grafite e diamantes, por exemplo. Estes minerais dificilmente são parecidos: um é opaco e macio (grafite é usado para fazer lápis), enquanto que o outro é transparente e duro. No entanto, o grafite e o diamante são parentes próximos, quimicamente falando, sendo ambos compostos de carbono. É a capacidade de dispersar a luz - devido à estrutura de suas ligações químicas - o que dá ao diamante o seu "brilho". Sabemos que isso se dá graças à cristalografia de raios-X.

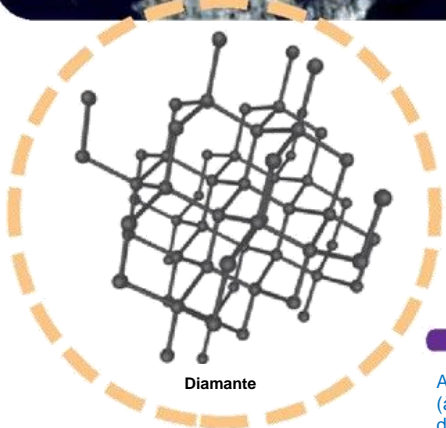
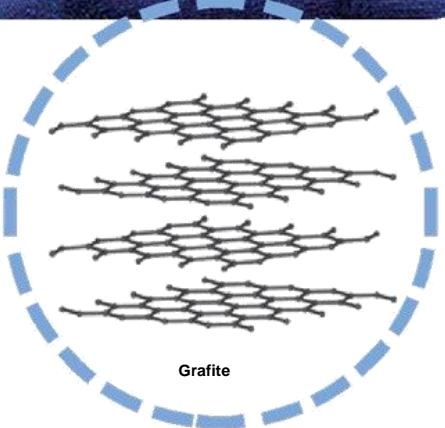
Em primeiro lugar, a cristalografia de raios-X só pode ser usada para examinar cristais sólidos com um arranjo regular de átomos. Pode-se estudar minerais, por exemplo, e muitos outros compostos, tais como sal ou açúcar. Também se pode estudar o gelo, mas só até que ele derreta.



Os flocos de neve são cristais. Sua simetria hexagonal é resultado da maneira na qual as moléculas de água são ligadas umas às outras.



Um pedaço de grafite (esquerda) e um áspero diamante (direita). Estes dois cristais podem não se parecer, mas eles são, realmente, intimamente relacionados, pois ambos são puro carbono. O que dá ao diamante o seu brilho é a sua capacidade para dispersar a luz, devido à estrutura de suas ligações químicas. Fotos: Wikipédia



A estrutura de cristal de grafite (à esquerda) é muito diferente da do diamante. © IUCr

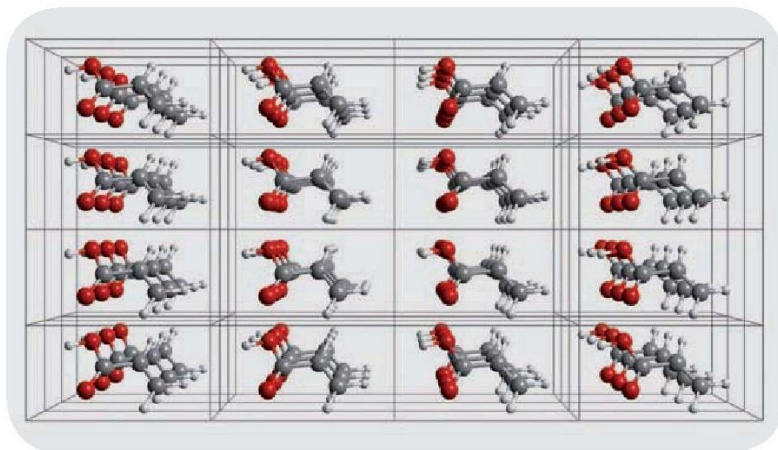


Imagem em 3D da estrutura do cristal.

Num cristal, átomos, grupos de átomos, íons ou moléculas têm um arranjo regular em 3D. © IUCr

No gelo derretido, que tornou-se líquido, o movimento de moléculas torna impossível registrar um sinal espalhado que possa ser interpretado. Cristalógrafos descobriram que podiam estudar materiais biológicos, tais como proteínas ou DNA, tornando-os cristais. Isto alargou o âmbito da cristalografia para a biologia e medicina. A descoberta veio em uma época em que o poder crescente de computadores fez isto possível para modelar a estrutura destes cristais mais complexos.

Depois de 100 anos de desenvolvimento, a cristalografia de raios-X tornou-se a técnica líder para estudar a estrutura atômica e propriedades relacionadas de materiais. É agora um centro de avanços em vários campos da ciência. Novos

métodos de cristalografia ainda estão sendo introduzidos e novas fontes (elétrons, nêutrons e luz síncrotron) tornaram-se disponíveis. Este desenvolvimento permitiu aos cristalógrafos estudar a estrutura atômica de objetos que não são cristais perfeitos, surgindo os quasicristais e cristais líquidos (aparelho de televisão).

O desenvolvimento de máquinas capazes de gerar luz intensa e raios-X (síncrotron) revolucionou a cristalografia. Grandes instalações de pesquisa de síncrotrons são usadas por cristalógrafos que trabalham em áreas como a biologia, a química, ciência de materiais, física, arqueologia e geologia. Síncrotrons permitem aos arqueólogos identificar a composição e idade de artefatos que remontam a dezenas de milhares de anos, e aos geólogos analisar e datar meteoritos e rochas lunares.

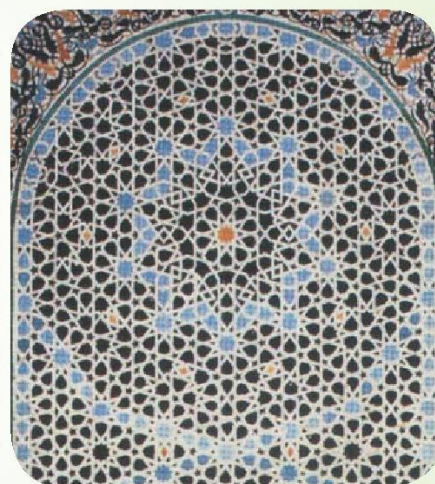
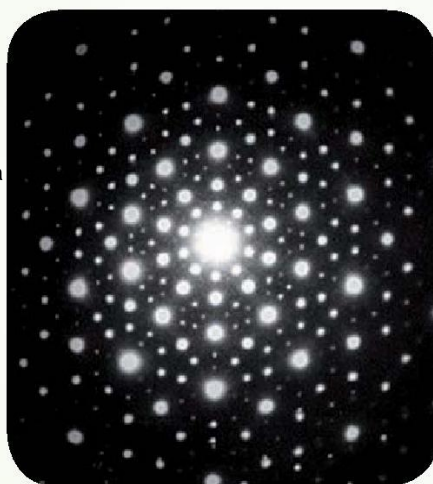
QUASICRISTAIS: DESAFIANDO AS LEIS DA NATUREZA

Em 1984, Dan Shechtman descobriu a existência de um cristal em que os átomos foram montados em um modelo que não poderia ser estritamente repetido. Este desafiou a sabedoria aceita sobre a simetria de cristais. Até então, pensava-se que apenas formas geométricas simétricas com 1, 2, 3, 4 ou 6 lados podiam ocorrer em forma de cristais, uma vez que apenas estas formas podem ser reproduzidas em três dimensões.

No entanto, quando Dan Shechtman observou uma liga de alumínio e manganês sob um microscópio, descobriu um pentágono (forma de cinco lados). Este 'Outlaw' veio a ser conhecido como um quasicristal.

Dan Shechtman, com esta descoberta inovadora, ganhou o Prêmio Nobel de Química em 2011.

Como consequência da forma como os átomos estão dispostos, quasicristais têm as seguintes propriedades: eles são duros e quebradiços e comportam-se quase como vidro, sendo resistentes à corrosão e aderência. Eles são agora utilizados em uma série de aplicações industriais, por exemplo: as painéis antiaderentes.



Fonte: imagem padrão de difração, Revista de Física (1984), vol. 53, pág. 1951-1953; Imagem de um mosaico, Associação Marroquina de Cristalografia.

Artesãos marroquinos (Maalems) realmente sabem sobre os padrões encontrados nos quasicristais há séculos. Setecentos anos separam as duas imagens acima. A imagem à esquerda mostra o padrão de difração de uma quasicristal obtido por Dan Shechtman em 1984. A foto à direita mostra um fino mosaico (zellij) no Attarine Madrasa em Fez (Marrocos), que data do Século 14. As imagens parecem muito semelhantes, com as duas, mostrando os padrões pentagonais.

Uma breve história

Ao longo da história, as pessoas foram fascinadas pela beleza e mistério dos cristais. Há dois mil anos, o naturalista romano Plínio, o Velho, admirou-se com a regularidade dos cristais de rocha sob a forma de prismas de seis lados. Nesta época, os processos de cristalização do açúcar e do sal já eram conhecidos das antigas civilizações indiana e chinesa. Os cristais de açúcar eram fabricados a partir de caldo de cana na Índia. Na China, o cristal de sal puro foi obtido a partir da água salgada. A cristalização foi igualmente desenvolvida no Iraque, no século 8 d.C. Dois séculos mais tarde, o Egito e a região da Andaluzia, na Espanha iriam dominar a técnica do corte de cristais de rocha para fabricar utensílios e objetos de decoração. Em 1611, o matemático e astrônomo alemão Johannes Kepler foi o primeiro a observar as formas simétricas dos flocos de neve e deduzir sua estrutura subjacente. Menos de 200 anos depois, o mineralogista francês René Haüy iria descobrir as leis geométricas da cristalização.

Em 1895, os raios-X foram descobertos por William Conrad Röntgen, que foi agraciado com o primeiro Prêmio Nobel de Física em 1901. Max Von Laue e seus colegas descobriram em seguida, que os raios-X atravessam o cristal interagindo com ele e, como resultado, acontecem difrações em direções particulares, dependendo da natureza do cristal. Esta descoberta valeu a Von Laue o Prêmio Nobel de Física em 1914.

Em 1913, uma outra descoberta importante foi aquela da equipe de William Henry Bragg e seu filho William Lawrence Bragg, segundo a qual os raios-X poderiam ser utilizados para determinar com precisão a posição dos átomos no interior de um cristal e assim desvendar sua estrutura tridimensional. Conhecida pelo nome de Lei de Bragg, esta descoberta contribuiu imensamente para o moderno desenvolvimento de todas as ciências naturais, porque a estrutura atômica governa as propriedades químicas e biológicas da matéria, assim como a estrutura cristalina governa a maior parte das propriedades físicas da matéria. A dupla Bragg foi agraciada com o Prêmio Nobel de Física em 1915.

De 1920 a 1960, a cristalografia de raios-X permitiu desvendar certos mistérios da estrutura do ser vivo, tendo um grande impacto no campo da medicina. Foi o caso, por exemplo, de Dorothy Hodgkin que desvendou as estruturas de um grande número de moléculas biológicas, tais como: o colesterol (1937), a penicilina (1946), a vitamina B12 (1956) e a insulina (1969). Em 1964 ela recebeu o Prêmio Nobel de Química. John Kendrew e Max Perutz foram os primeiros a elaborar a estrutura cristalina de uma proteína, e ganharam o Prêmio Nobel de Química, em 1962. Desde essa descoberta, a estrutura cristalina de mais de 90.000 proteínas, ácidos nucleicos e outras moléculas biológicas foram determinados usando a cristalografia de raios-X.

Um dos maiores marcos do século 20 foi a descoberta da estrutura cristalina de DNA por James Watson e Francis Crick. Mas o que é menos conhecido é o fato de que esta descoberta foi feita com base em experiências de difração realizadas por Rosalind Franklin, que morreu prematuramente em 1958. A descoberta da "dupla hélice" abriu a visão da cristalografia para as macromoléculas e proteínas, elementos essenciais da biologia das ciências médicas hoje em dia. Junto com Maurice Wilkins, que tinha trabalhado com Rosalind Franklin, Watson e Crick foram agraciados com o Prêmio Nobel de Fisiologia em 1962.

A cristalografia e os métodos cristalográficos continuaram a se desenvolver ao longo dos últimos 50 anos. Em 1985, por exemplo, o Prêmio Nobel de Química foi atribuído a Herb Hauptman e Jerome Karle por terem desenvolvido novos métodos de análise de estruturas cristalinas. Como resultado, as estruturas cristalinas de um grande número de compostos foram decifradas.

Recentes prêmios Nobel foram concedidos a Venkatraman Ramakrishnan, Thomas Steitz e Ada Yonath (2009); a Andre Geim e Konstantin Novoselov (2010) por seu trabalho pioneiro sobre o grafeno, o primeiro de uma nova classe de materiais de estruturas cristalinas bidimensional com propriedades eletrônicas e mecânicas únicas; para Dan Shechtman (2011) por ter descoberto os quasicristais (ver quadro na página 2) e a Robert Lefkowitz e Brian Kobilka (2012) por ter revelado o funcionamento interno de uma importante família de receptores celulares que regulam praticamente todas as funções do corpo humano.



Cofre relicário fabricado no Egito entre 12º e 13º século e decorado com pedras preciosas e pérolas.

© Musée de Cluny, na França

Ao todo, 45 cientistas foram premiados com o Prêmio Nobel, no século passado, pelos trabalhos direta ou indiretamente relacionados à cristalografia. Não há espaço suficiente para listar todos eles nesta brochura, mas foi graças às suas contribuições individuais que a cristalografia ajudou no desenvolvimento de todas as ciências. Hoje, a cristalografia permanece um terreno fértil para inovadores e promissores trabalhos fundamentais de investigação.

Por que países precisam investir em cristalografia?

A cristalografia é a base do desenvolvimento de praticamente todos os novos materiais, e compreende os produtos de consumo diário, como cartões de memória do computador, as telas de televisão plana e os componentes de veículos e aviões. Os cristalógrafos não só estudam a estrutura dos materiais, mas também utilizam seus conhecimentos para modificar uma estrutura e lhe conferir novas propriedades ou fazê-la se comportar de forma diferente. Os cristalógrafos podem também estabelecer as "impressões digitais" dos materiais assim obtidos. Uma empresa pode, então, usar essa "impressão digital" para provar que a nova substância é única quando se candidata a uma patente.

Na verdade, a cristalografia tem muitas aplicações. Ela permeia nossa vida diária e forma a espinha dorsal da indústria que é cada vez mais dependente da geração e do desenvolvimento de novos produtos. Por exemplo, *as indústrias agro-alimentar, aeronáutica, automobilística, cuidados de beleza, de informática, eletro-mecânica, farmacêutica e de mineração são beneficiárias diretas das aplicações da cristalografia.* Abaixo seguem alguns exemplos:

A mineralogia é, sem dúvida, o ramo mais antigo da cristalografia. Cristalografia de raios-X tem sido o principal método de determinar a estrutura atômica dos minerais e metais desde 1920. Praticamente tudo o que sabemos sobre rochas, formações geológicas e história da Terra é baseado em cristalografia. Mesmo o nosso conhecimento dos "visitantes cósmicos", como meteoritos vem da cristalografia. Este conhecimento é, obviamente, essencial para a mineração e qualquer indústria que perfura a Terra, tais como as indústrias de água, petróleo, gás e energia geotérmica.

Projetos de medicamentos dependem fortemente do uso das técnicas da cristalografia. Uma empresa farmacêutica procurando um novo medicamento para combater uma bactéria ou um vírus precisa inicialmente encontrar uma molécula capaz de inibir as proteínas ativas (enzimas) que são envolvidas no ataque das células humanas. Conhecer a forma exata da proteína permite aos cientistas conceber a composição das substâncias ativas do medicamento que podem se fixar sobre os locais ativos da proteína, e assim, parar sua atividade prejudicial.

A cristalografia é também essencial para a distinção de diferentes formas sólidas de um medicamento. Estas formas podem ser solúveis sob diferentes condições, o que influencia a eficácia do medicamento. Isso é importante para as indústrias farmacêuticas produtoras de medicamentos genéricos, especialmente na África e na Ásia onde as drogas anti-HIV são produzidas com um licenciamento compulsório, tornando-as acessíveis aos mais pobres.

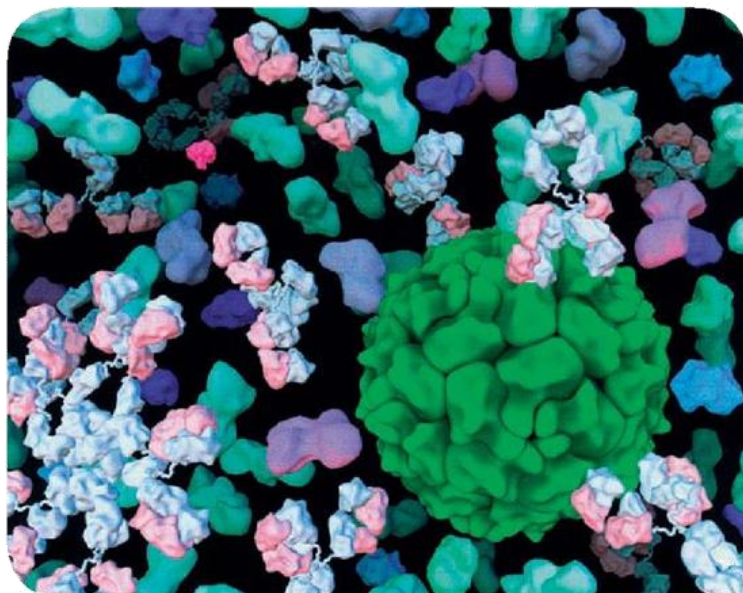
Novos materiais são utilizados para desenvolver roupas inteligentes que permitem a passagem do ar, atenuam o calor para evitar que o usuário transpire ou trema de frio. Roupas interiores podem ser equipadas com sensores para medir a temperatura do corpo, o ritmo da respiração e o batimento cardíaco para, em seguida, transmitir mensagens para o celular da pessoa. As vestes exteriores poderiam ser concebidas para detectar ameaças de gases tóxicos, bactérias ou mesmo calor excessivo. Os cristalógrafos podem identificar as propriedades necessárias para desenvolver essas vestimentas.

© Sharee Basinger/
publicdomainpictures.net



Hoje, cristalógrafos são capazes de estudar uma ampla variedade de materiais, incluindo cristais líquidos. Os painéis de cristais líquidos são utilizados nas telas de televisores (foto), de computadores, de telefones celulares, de relógios digitais e assim por diante. O cristal líquido não produz luz própria, mas sim chama uma fonte externa - como a luz de volta em uma televisão - para formar imagens, contribuindo para o baixo consumo de energia.

@ Shutterstock / Andrey_Popov



A manteiga de cacau, o ingrediente mais importante do chocolate, cristaliza-se em seis formas diferentes, mas apenas uma agradavelmente derrete na boca e possui uma superfície brilhante sólida e cristalina que o torna tão saboroso. Esta forma de cristal "saborosa" tende a se converter em uma forma mais estável, que é macia, e derrete lentamente na boca, produzindo uma sensação áspera e arenosa. Felizmente, essa conversão é lenta, mas se o chocolate é armazenado durante um longo período de tempo ou a uma temperatura ambiente, pode desenvolver um resíduo branco sobre sua superfície, característico da sua recristalização. Os mestres chocolateiros devem então recorrer a um processo sofisticado de cristalização para obter a forma de cristal mais desejável, o único aceito por gourmets e consumidores. Foto: Wikipédia

O robô Curiosity Rover utilizou a cristalografia de raios-X em outubro de 2012 para analisar amostras do solo do planeta Marte. A NASA equipou o Rover com um difratômetro. Os resultados sugeriram que a amostra de solo marciano é semelhante aos solos basálticos dos vulcões do Havaí. Foto: NASA



Os anticorpos se ligam a um vírus. A cristalografia é usada para controlar a qualidade de medicamentos fabricados, incluindo drogas antivirais, na fase de produção em massa, a fim de assegurar um rigoroso respeito às normas de saúde e segurança. © IUCr



Quem organiza o Ano Internacional da Cristalografia?

O ano está sendo organizado conjuntamente pela União Internacional de Cristalografia (IUCr) e a UNESCO. Este ano servirá de ligação entre dois anos internacionais liderados pela UNESCO; em contribuição para as *ações de acompanhamento do Ano Internacional da Química (2011)* e *servindo de introdução ao Ano Internacional da Luz (2015)*. A UNESCO está implementando os três anos, através de seu *Programa Internacional de Ciências Básicas*.

Por que agora?

O Ano Internacional de Cristalografia comemora o centenário do nascimento da cristalografia de raios-X, graças ao trabalho de Max Von Laue e William Henry e William Lawrence Bragg. O ano de 2014 também comemora o 50º aniversário de outro Prêmio Nobel, concedido a Dorothy Hodgkin por seu trabalho sobre vitamina B12 e penicilina.

Apesar da cristalografia ser hoje a base de todas as ciências experimentais, ela continua desconhecida para o público em geral. Um dos objetivos do Ano da Cristalografia é o de promover a educação e a conscientização do público através de uma grande variedade de atividades.

Cristalógrafos estão ativos em mais de 80 países, dos quais 53 já são membros da União Internacional de Cristalografia. A IUCr assegura a todos os seus membros a igualdade de acesso à informação, fornece dados e promove a cooperação internacional.

Há uma necessidade de ampliar a base da cristalografia, a fim de permitir aos países em desenvolvimento adquirir mais experiência neste campo fundamental para o seu progresso científico e industrial. Isto é tão urgente, na medida em que a cristalografia irá desempenhar um papel fundamental na transição para o desenvolvimento sustentável, nas próximas décadas.

Países membros da União Internacional de Cristalografia



Desafios para o futuro

Em 2000, os governos do mundo adotaram os Objetivos do Desenvolvimento do Milênio das Nações Unidas, que estabelecem objetivos específicos para 2015 visando reduzir a pobreza extrema e a fome, melhorar o acesso à água potável e saneamento básico, reduzir a mortalidade infantil e melhorar a saúde materna, entre outros desafios.

Os governos preparam atualmente um conjunto de metas que determinará a agenda de desenvolvimento para o período pós 2015. A seguir estão alguns exemplos de como a cristalografia pode contribuir para a realizações destas metas.

Desafios alimentares

A população mundial deverá crescer de 7 bilhões em 2011 para 9,1 bilhões até 2050. A combinação de um rápido crescimento populacional e de uma dieta mais enriquecida de carnes e produtos lácteos aumentará a demanda de alimentos em 70% até 2050. Isto representa um grande desafio para o setor agroalimentar.

As técnicas cristalográficas de ponta são essenciais às pesquisas no setor agroalimentar. A cristalografia pode ser usada para analisar os solos, por exemplo. Uma das causas grave de deterioração dos solos é a salinização, que pode ocorrer naturalmente ou ser induzida por atividades humanas.

Estudos estruturais em proteínas vegetais podem ajudar a desenvolver culturas mais resistentes em ambientes salinos.

A cristalografia pode também contribuir para o desenvolvimento de tratamentos contra as pragas das plantas e doenças dos animais, sendo um exemplo a investigação sobre cancro em espécies vegetais como tomate, ou o desenvolvimento de vacinas para prevenir doenças como a gripe aviária ou suína.

Além disso, os estudos de cristalografia sobre bactérias são importantes para a produção de produtos alimentares derivados do leite, da carne, de legumes e de outras plantas.

Desafios da água

Embora um dos Objetivos do Milênio, o de reduzir pela metade a proporção de pessoas sem acesso à água potável até 2015, tenha tido uma atenção especial, a África Subsaariana e os estados árabes estão ficando para trás, de acordo com o Relatório Mundial de Desenvolvimento da Água (2012), produzido pela Organização das Nações Unidas. O mesmo objetivo relativo ao saneamento básico aparece atualmente fora do alcance, desde que metade da população das regiões em desenvolvimento ainda não tem acesso. Além disso, o número de pessoas nas cidades que não têm acesso a um abastecimento de água potável e saneamento é estimado que tenha crescido 20% desde a adoção dos Objetivos do Milênio. A população urbana tem previsão de quase dobrar entre 2009 e 2050, passando de 3,4 bilhões a 6,3 bilhões.

A cristalografia pode ajudar a melhorar a qualidade da água em comunidades pobres, através da identificação de novos materiais que possam purificar a água por muitos meses, como filtros nanoesponjas (TAP) e nanotablets. Ela também pode ajudar a desenvolver soluções ecológicas para melhorar as instalações sanitárias.

Desafios energéticos

Considerando que a problemática energética esteve ausente dos Objetivos de Desenvolvimento do Milênio, e que deveria ser um dos principais focos da agenda de desenvolvimento pós 2015, em setembro de 2011, o Secretário Geral da ONU lançou a "Energia Sustentável para Todos". Isto vem em um momento de crescente preocupação com o impacto sobre o clima das economias baseadas em combustíveis fósseis e o reconhecimento da necessidade de acelerar a transição para fontes de energias sustentáveis. De acordo com a Agência Internacional de Energia, as emissões de dióxido de carbono (CO₂) aumentaram 5% entre 2008 e 2010 para atender 30,6 gigatoneladas (Gt), apesar da crise financeira internacional. Se o mundo quer limitar o aquecimento global a 2°C neste século, as emissões de CO₂ não devem ultrapassar 32 Gt em 2020.

Cristalografia pode identificar novos materiais que purificam a água por muitos meses, tal como nanoesponjas (filtros de torneira) e nanotablets. © Shutterstock / S_E



No entanto, o consumo mundial de energia deverá subir em 50% entre 2007 e 2035, sendo que os países não membros da OCDE serão responsáveis por 84% do aumento. Em 2009, 1,4 bilhão de pessoas ainda não tinham acesso à eletricidade. A demanda por energia proveniente de fontes renováveis deverá ter um aumento de 60% em 2035.

A cristalografia pode desenvolver novos produtos que reduzam o consumo de energia de uma casa (e fatura de aquecimento), reduzindo as emissões de carbono, tais como materiais isolantes. Pode também identificar novos materiais que reduzam o custo de painéis solares, moinhos de vento e baterias ao torná-los mais eficientes, para reduzir o desperdício e melhorar o acesso às tecnologias verde.

Verdejando a indústria química

Ter uma indústria química verde será fundamental para uma economia global verde. A indústria química produz mais de 70.000 produtos diferentes, que vão desde plásticos e fertilizantes a detergentes e medicamentos. Ela é altamente dependente do petróleo, pois consome 10% da produção mundial para fazer 80-90% de seus produtos. A indústria química é, portanto, uma grande consumidora de energia e recursos.

Além disso, muitos solventes e catalisadores são tóxicos e o descarte de resíduos químicos é complicado e caro. As substâncias tóxicas e cancerígenas são liberadas no ar, solo e água. De acordo com o Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente, a Europa Ocidental produziu um total de 42 milhões de toneladas de resíduos tóxicos em 2000, dos quais cinco milhões foram exportados, um ano depois.

A cristalografia pode contribuir para o desenvolvimento de materiais de construção ecológicos em países desenvolvidos e em desenvolvimento. Ela também pode ajudar a reduzir a poluição através da substituição dos solventes químicos por solventes inorgânicos "verdes" à base de líquidos iônicos e de CO₂. Ela pode ajudar a reduzir os dejetos minerais e custos relacionados, contribuindo com o desenvolvimento de métodos que permitam extrair somente o material necessário.

Desafios da saúde

Estes desafios continuarão a ser consideráveis nas próximas décadas. Ainda não há nenhuma vacina eficaz ou cura para tais pandemias como: o HIV/AIDS, dengue e malária, que continuam a devastar o mundo, em particular nos países em desenvolvimento.

Muitos problemas de saúde nos países em desenvolvimento estão ligados à falta de acesso à água limpa e saneamento seguro, incluindo doenças como a cólera ou esquistossomose crônica, com uma estimativa de pelo menos 90% dos casos relatados, na África.

No entanto, os países em desenvolvimento também estão expostos às mesmas doenças crônicas que os países desenvolvidos, incluindo doenças cardíacas, câncer e, cada vez mais, a diabetes.

Outros problemas sérios de saúde que afetam os países ricos e pobres incluem o surgimento de novos agentes patogênicos e da crescente resistência das bactérias aos tratamentos médicos existentes.

A cristalografia pode enfrentar a resistência crescente das bactérias aos antibióticos. Venkatraman Ramakrishnan, Thomas Steitz e Ada Yonath conseguiram determinar a estrutura do ribossomo e seu funcionamento quando afetado pelos antibióticos. Os ribossomos são responsáveis pela produção de todas as proteínas em células vivas, incluindo as de seres humanos, plantas e bactérias. Se o trabalho do ribossomo é impedido, a célula morre. Os ribossomos são um alvo importante para os antibióticos, desde que os antibióticos sejam capazes de travar a atividade ribossomal das bactérias prejudiciais, sem, entretanto, perturbar o funcionamento dos ribossomos humanos. Em 2008, o Prof. Yonath foi agraciado com o Prêmio UNESCO - Oréal "Para as Mulheres e a Ciência" pelo seu trabalho e, um ano depois, os três cientistas receberam o Prêmio Nobel.

Os trópicos, em particular, são abençoados com uma rica biodiversidade que muitas vezes permanece inexplorada. A cristalografia pode ajudar os países a identificar as propriedades e comportamento das plantas endógenas, com vista ao desenvolvimento de produtos de beleza, de remédios à base de ervas etc.

Quem se beneficiará com o Ano Internacional da Cristalografia?

O ano terá como alvo os governos

Interagindo com eles e aconselhando sobre a concepção de políticas para:

- ❖ financiar a criação e o funcionamento de pelo menos um centro nacional de cristalografia por país;
- ❖ desenvolver a cooperação com os centros de cristalografia no exterior, bem como com sincrotrons e outras instalações de grande porte;
- ❖ incentivar o uso da cristalografia em pesquisa e desenvolvimento;
- ❖ promover a pesquisa em cristalografia;
- ❖ *introduzir a cristalografia em escolas de educação básica e em universidades a fim de contextualizar e modernizar os currículos ora existentes.*

Além disso, reuniões de cúpula regional estão planejadas para destacar as dificuldades na condução de pesquisas científicas de alto nível em algumas partes do mundo e identificar maneiras de superá-las. As reuniões permitirão aos países que são diferentes em língua, etnia, religião ou fatores políticos, delinear e projetar futuras perspectivas para a ciência e tecnologia. Esses encontros serão, igualmente, a ocasião para estimular o desenvolvimento industrial, identificando oportunidades de empregos no domínio da cristalografia.

O ano terá como alvo as escolas e universidades

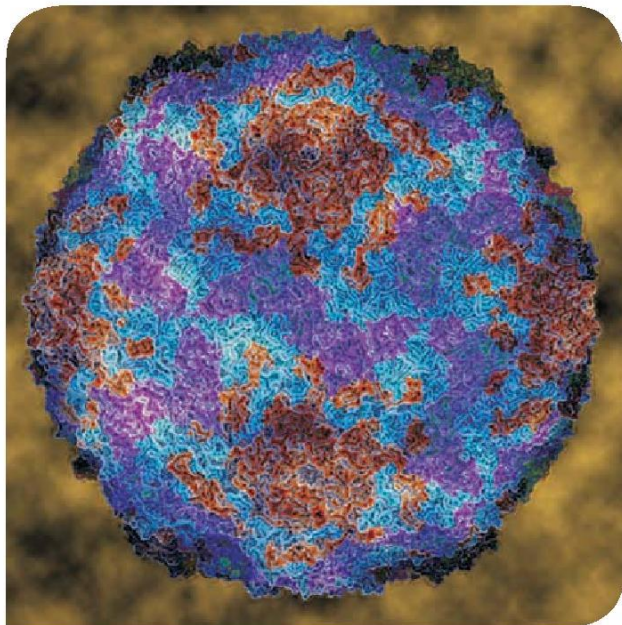
Para introduzir o ensino da cristalografia onde ainda está ausente, através de:

- ❖ criação de laboratórios preparados pela União Internacional de Cristalografia, na Ásia, África e América Latina, em colaboração com os fabricantes de difratômetro;
- ❖ fomentar a iniciativa da implantação de cursos de cristalografia na Ásia e na **América Latina**; desenvolver a cristalografia nas universidades africanas;
- ❖ **promover demonstrações práticas e concursos educativos sobre o tema nas escolas primárias e secundárias;**
- ❖ promover a criação de projetos, referentes a resolução de problemas no âmbito da cristalografia (física, química e matemática) destinados a alunos de educação básica e universidade.

- ❖ a organização de uma exposição itinerante pela Associação Marroquina de Cristalografia, baseada no tema "A Cristalografia e a Arte Geométrica no mundo árabe-islâmico". A exposição vai também demonstrar a cristalização e difração de raios-X com ajuda de um difratômetro portátil.

Nos últimos 20 anos, o número de pessoas com diabetes em todo o mundo aumentou de 30 para 230 milhões, de acordo com a Federação Internacional de Diabetes. Sete de dez países mais afetados pela diabetes são países em desenvolvimento ou economias emergentes, como a China e Índia. No Caribe e Oriente Médio, 20% da população adulta sofre de diabetes. Se a estrutura da insulina natural, produzida pelo pâncreas, não tivesse sido determinada pela cristalografia de raios-X, seria impossível fabricar a insulina biossintética "humana". Foto: Wikipédia





Vírus. Você não pode criar medicamentos sem conhecer a estrutura das proteínas do agente patogênico. © IUCr

O ano terá como alvo o público em geral

Para aumentar a conscientização sobre o papel da cristalografia no desenvolvimento tecnológico na sociedade moderna, e também o seu papel na herança cultural e na história da arte, através de:

- ❖ conferências públicas organizadas por membros da União Internacional de Cristalografia em temas como a importância primordial de estruturas cristalinas da proteína, na elaboração de medicamentos, a cristalografia e a simetria na arte, ou a análise cristalográfica de obras de arte e documentos antigos;
- ❖ patrocínio de exposições destacando a utilidade e as maravilhas da cristalografia;
- ❖ a submissão de artigos para a imprensa escrita, televisão e outras mídias sobre a contribuição da cristalografia para a economia global.

DESENVOLVIMENTO EM CRISTALOGRAFIA NAS UNIVERSIDADES AFRICANAS



© Serah Kimani

Uma das principais missões da União Internacional de Cristalografia é fornecer aos professores e doutores em países em desenvolvimento a formação em ensino de cristalografia, assim como familiarizá-los com os métodos de ensino e pesquisa.

Em colaboração com universidades sul-Africanas e Associação Cristalográfica Sul-Africana, a União organizou uma série de cursos ao longo da última década em países africanos de língua inglesa. A parceria também premiou com uma bolsa dois excepcionais estudantes de doutoramento do Quênia, Serah Kimani (foto) e Ndoria Thuku, para capacitá-los para completar a sua tese na África do Sul. A tese de Serah Kimani retratou a determinação de nada menos que 40 estruturas cristalinas. Ela formou-se na Universidade da Cidade do Cabo, em 2012. A tese de Ndoria Thuku envolveu a determinação da estrutura cristalográfica de *Rhodococcus rhodochrous*, uma bactéria utilizada como uma vacina para o solo a fim de melhorar a saúde das plantas na agricultura e horticultura. Desde que se formou em 2012, o Dr. Thuku tem sido um pesquisador na Divisão de Bioquímica Médica da Universidade da Cidade do Cabo.

Em 2011, a União Internacional de Cristalografia concebeu um programa ambicioso para os países da África Subsaariana. Conhecido como Iniciativa para a Cristalografia na África, o programa não só treina o pessoal docente e doutores em cristalografia, mas também oferece às universidades participantes difratômetros no valor entre 80.000 e 150.000 € cada um, a fim de capacitá-los para conduzir pesquisas de nível internacional. Um parceiro fundamental neste esforço é Bruker França, uma entidade privada que concordou em fornecer difratômetros em perfeito estado de funcionamento para todas as universidades identificadas pela União. A União cobre o custo de entregar o difratômetro em cada universidade. Em troca, as universidades beneficiadas mantêm o difratômetro e cobrem o custo dos equipamentos relacionados, tais como o computador e tubos de raios-X.

O ano terá como alvo a comunidade científica

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

- ❖ lançamento de um jornal de livre acesso sobre a cristalografia, que será chamado IUCrJ;
- ❖ projetos conjuntos de pesquisas que envolvem grandes instalações síncrotron nos países desenvolvidos e países em desenvolvimento, tais como: a instalação no Brasil ou a instalação SESAME no Oriente Médio, nascida de um projeto da UNESCO;
- ❖ consultas para identificar a melhor maneira de salvar todos os dados de difração recolhidos em instalações de grande porte e laboratórios de cristalografia.



Capa da primeira edição do novo jornal de Cristalografia com acesso, disponível em: www.iucrj.org

O primeiro corpo docente a ser treinado em como utilizar estes instrumentos foi o da Universidade de Dschang nos Camarões. O pessoal docente e estudantes PhD receberam um curso intensivo de 20 horas em fevereiro de 2012, a fim de prepará-los para a chegada do difratômetro no ano seguinte.

A Associação Camaronesa de Cristalografia foi fundada neste momento. A jovem associação ofereceu seu primeiro curso de 7 a 13 de Abril de 2013, em Dschang, que atraiu 24 professores e estudantes de doutorado da universidade de Camarões e de regiões próximas. Esse estágio financiado pela União Internacional de Cristalografia, pela Associação Camaronesa de Cristalografia, pela Universidade de Dschang e Bruker, focou os meios de determinação das estruturas cristalinas pela difração.

Os próximos países a se beneficiar da iniciativa serão a Costa do Marfim, Gabão e Senegal. Uma universidade está sendo alvo em cada país. Esta universidade, por sua vez, deverá treinar equipes de outras universidades no país e representar o papel de Centro Nacional de Cristalografia. Cada centro nacional terá livre acesso às publicações especializadas da União Internacional de Cristalografia.

A União Internacional de Cristalografia está contatando outros patrocinadores, a fim de generalizar a iniciativa para a Cristalografia na África em todo o continente.

O Ano Internacional da Cristalografia deverá, também, tornar possível estender a iniciativa para os países em desenvolvimento da Ásia e América Latina.

Para mais detalhes:
clau.de.lecomte@crm2.uhp-nancy.fr



Prof. Claude Lecomte, Vice-Presidente da IUCr, ensinando a cristalografia no curso da Universidade de Dschang em Camarões, em fevereiro de 2012.
© Patrice Kenfack / Associação Camaronesa de Cristalografia.

Simetria na arte e arquitetura

Seja um rosto humano, uma flor, um peixe, uma borboleta ou um objeto sem vida, como uma concha do mar, a simetria permeia o mundo natural. Ela sempre fascinou as civilizações humanas, que a refletiram em sua arte e arquitetura.

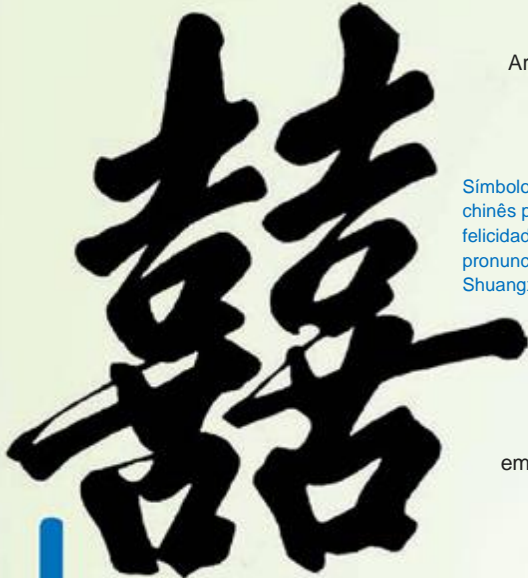
Simetria pode ser encontrada em todas as expressões de criatividade humana: carpetes e tapetes, cerâmica, desenho, pintura, poesia, escultura, arquitetura, caligrafia etc. Há simetria no alfabeto chinês. Simetria na arte e na arquitetura chinesa é uma manifestação da filosofia buscando a harmonia através do equilíbrio.



Cabeça de bronze Yorubá - Cidade nigeriana de Ife, do século 12 d.C.
Foto: Wikipédia

Arte e arquitetura podem demonstrar diferentes formas de simetria. Diz-se que um motivo que se repete infinitamente representa uma simetria de translação. Ele pode ser unidimensional como o friso abaixo, ou bidimensional como os animais alados na imagem abaixo.

Símbolo chinês para felicidade, pronuncia-se Shuangxi



Na simetria bilateral, o lado esquerdo e direito são imagens de espelho um do outro. Um exemplo na natureza é uma borboleta. Simetria bilateral sempre foi uma característica comum da arquitetura, sendo exemplos históricos: o Taj Mahal, (Índia), a Cidade Proibida (China) ou o templo maia de Chichen Itza (México).

Simetria bilateral também é comum na arte, embora seja rara na pintura.

Imagem bidimensional por Maurits Cornelis Escher (Holanda). © M C Escher Foundation



Se uma figura pode ser girada sobre seu eixo ou um determinado ponto, sem mudar sua forma original, se diz que ela apresenta uma simetria de rotação. As pirâmides de Gizé, no Egito, por exemplo, mostram uma simetria de rotação de ordem quatro (incluindo a base). O interior da cúpula da Mesquita Lotfollah no Irã mostra uma simetria rotacional de ordem 32, em torno do ponto localizado no centro da figura.

Os padrões geométricos têm permeado a arte de muitas civilizações. Exemplos disso são as pinturas de areia dos índios Navajo da América do Norte, o Kolam do sul da Índia, o batik da Indonésia (tingimento), a arte dos aborígenes Australianos e as mandalas Tíbetanas.



Taj Mahal, na Índia, concluído em 1648, Patrimônio Mundial da UNESCO
Foto: Muhammad Mahdi Karim / Wikipédia



Templo maia em Chichen Itza no México, que floresceu entre 600-900, d.C., Patrimônio Mundial da UNESCO © S. Schneegans / UNESCO



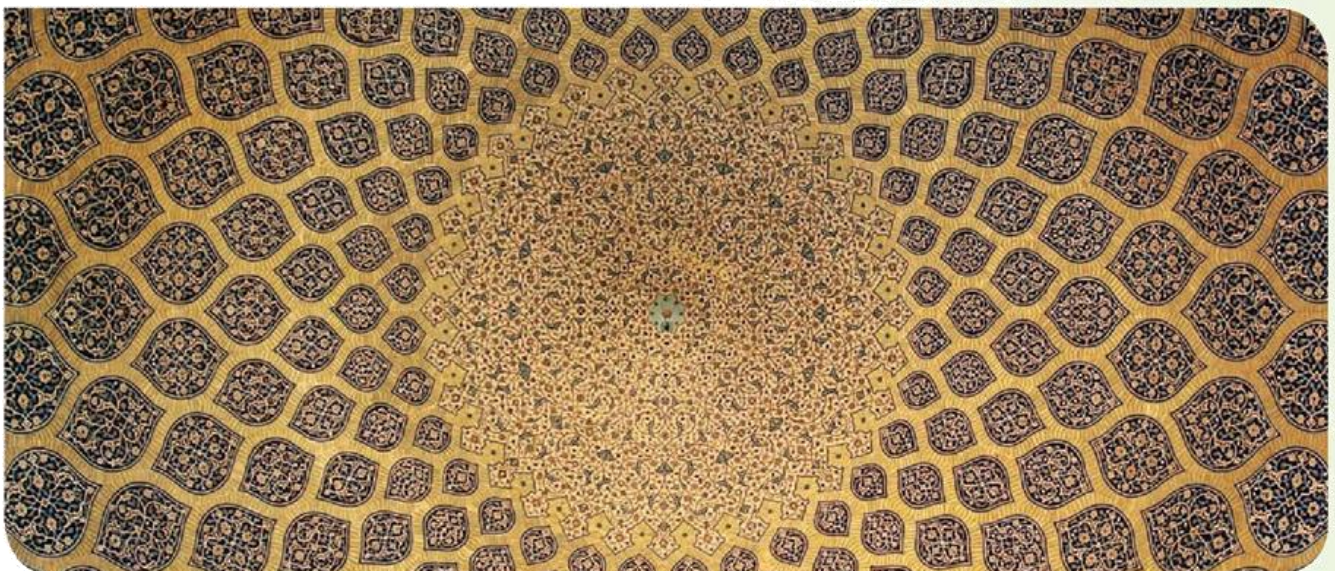
Civilizações islâmicas por volta do século 7 começaram a utilizar padrões geométricos em mosaicos e em outras formas de arte a fim de conectar a espiritualidade à ciência e à arte. Arte islâmica pode ter inspirado a Escola Ocidental da abstração geométrica do século 20, da qual foram proponentes Maurits Cornelis Escher e Bridget Riley. Escher foi supostamente inspirado por uma visita ao palácio mouro de Alhambra, na Espanha.

Ao longo de 2014, a Associação Marroquina de Cristalografia realiza uma exposição itinerante sobre Cristalografia e arte geométrica no mundo árabe-islâmico. Para mais informações, escreva para: Abdelmalek Thalal: abdthlal@gmail.com



Teto em forma de cúpula da Mesquita Lotfollah no Irã, concluída em 1618, hoje um Patrimônio Mundial da UNESCO.
 Photo: Phillip Maiwald / Wikipédia

Kolans podem ser encontrados como este Tamil Nadu, desenhados com pó de arroz ou em giz, diante das casas no, sul da Índia, pra trazer prosperidade. Esses padrões podem ser renovados diariamente.
 Photo: Wikipédia



Al-Attarine Madrasa (escola) em Fez, Marrocos, Patrimônio Mundial. Foi construído pelo Marinid Sultan Osman II Abu Said em 1323-1325. © A. Thalal



Shadow Play por Bridget Riley, Reino Unido, 1990 Foto: Wikipédia

Friso unidimensional
 Associação Marroquina de Cristalografia

Image: Moroccan Crystallographic Association



Como pode o meu país participar do Ano da Cristalografia em 2014?

Qualquer país interessado no desenvolvimento da indústria baseada no conhecimento ou no valor agregado de suas matérias-primas possui uma capacidade endógena para a cristalografia. Com efeito, o Ano Internacional da Cristalografia oferece a oportunidade de desenvolvimento para a África, Estados Árabes, América Latina e Caribe, e Ásia, para promoverem ações em favor da cristalografia nas suas regiões.

Formas de melhorar a formação e a pesquisa

A cristalografia é uma ciência interdisciplinar que abrange a física, a química, a ciência dos materiais, a geologia, a biologia, a medicina, assim como as ciências farmacêuticas. Os cientistas com formação em qualquer um destes campos são, portanto, potenciais cristalógrafos. Ao longo de 2014, a União Internacional de Cristalografia incentivará mais países a se tornarem membros, a fim de facilitar a cooperação internacional na formação e na pesquisa, bem como o acesso à informação e ao conhecimento.

Uma vez treinados, cristalógrafos precisam de infraestrutura adequada, a fim de aplicar suas habilidades. A UNESCO e União Internacional de Cristalografia recomendam que os governos estabeleçam pelo menos um centro nacional de cristalografia equipado com um difratômetro e que seja dotado com um financiamento permanente. Uma vez que o difratômetro estiver devidamente equipado para a análise da estrutura de um cristal, os pesquisadores do centro de cristalografia podem modelá-lo usando um software cristalográfico. Como parceiros no ano, fabricantes de difratômetro vão garantir um preço acessível para a compra deste equipamento e, além disso oferecer treinamento local para a sua manutenção.

É importante que os governos implementem políticas que facilitem a ligação entre o Centro Nacional da Cristalografia com as universidades e a indústria do país, bem como com outros centros de cristalografia em todo o mundo, a fim de conduzir uma política de desenvolvimento durável baseada no conhecimento científico.

A parede de blindagem concluída na sala SESAME, fonte de luz Síncrotron no Oriente Médio. Este Centro Intergovernamental de Pesquisa baseado na Jordânia, foi criado sob os auspícios da UNESCO e reúne Bahrein, Chipre, Egito, Irã, Israel, Jordânia, Paquistão, autoridade Palestina e Turquia, bem como 13 Estados membros observadores, que incluem Japão e EUA. A construção do SESAME foi concluída em 2008 e o laboratório deverá estar em pleno funcionamento no início de 2016. © SESAME



Os governos também devem favorecer as relações entre os Centros Nacionais de Cristalografia e os centros síncrotron existentes, tal como o SESAME na Jordânia.

A fim de compartilhar os conhecimentos do desenvolvimento científico e tecnológico em cristalografia e dar maior visibilidade às publicações de cristalógrafos de países em desenvolvimento, a União Internacional de Cristalografia lançará um jornal de livre acesso, IUCrJ.

A UNESCO e a União Internacional de Cristalografia também encorajam os governos a criar centros regionais e sub-regionais, oferecendo treinamento e experimentação em cristalografia, a fim de racionalizar os recursos em capacitação institucional.

Formação de cristalógrafos do amanhã

Agora é o momento de cada país formar um número suficiente de cristalógrafos. Governos podem tomar medidas para modernizar currículos escolares e universitários, **promovendo uma melhor correlação entre cristalografia e os currículos de física, química, biologia e geologia**. A UNESCO e a União Internacional de Cristalografia estão prontas para dar assistência aos governos na revisão e no desenvolvimento desses novos currículos.

Os governos são também convidados a manifestar seu interesse em sediar o laboratório itinerante de cristalografia que foi especialmente projetado para os estudantes e jovens pesquisadores dos países em desenvolvimento.

A União Internacional de Cristalografia também desenvolveu projetos de olimpíadas e competições entre escolas referentes à cristalografia, apelando para seus conhecimentos de física e química. O objetivo é demonstrar as aplicações práticas destas ciências para o desenvolvimento da agricultura, elaboração de medicamentos, novos materiais "verdes" e assim por diante. Países são convidados a manifestar interesse na organização de tais competições a nível nacional.



Para participar do Ano Internacional da Cristalografia

Os 195 Estados-Membros da UNESCO são convidados a contatar a equipe do Programa Internacional relativo às ciências fundamentais da UNESCO ou a União Internacional de Cristalografia, a fim de estabelecer um programa nacional de implementação do Ano Internacional em 2014.

União Internacional de Cristalografia

Prof. Gautam Desiraju,

Presidente: desiraju@sscu.iisc.ernet.in

Prof. Claude Lecomte,

Vice-Presidente: claudel.comte@crm2.uhp-nancy.fr

Dr. Michele Zema,

Diretor do Projeto IUCr: mz@iucr.org

UNESCO

Prof. Maciej Nalecz, Diretor,
Secretário Executivo do Programa relativo às
ciências fundamentais da UNESCO

m.nalecz@unesco.org

Dr. Jean-Paul Ngome Abiaga, Especialista do
Programa

jj.ngome-abiaga@unesco.org

Dr. Ahmed Fahmi,

Especialista do Programa: a.fahmi@unesco.org



A cristalografia ajuda a determinar a combinação ideal de alumínio e magnésio em ligas utilizadas na fabricação dos aviões. Com efeito, muito alumínio e o avião ficará muito pesado, muito magnésio e ele ficará mais inflamável.
© Shutterstock / IM_photo

O programa de eventos para o ano, assim como os recursos pedagógicos estão disponíveis no site oficial:

www.iycr2014.org

