

ANUÁRIO CIENTÍFICO



Resumos de Artigos de Comunicações e Tese

2001

INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA

PERMISSIDADE DE GEOTÊXTEIS E PRODUTOS AFINS: APLICAÇÃO DA NORMA EN ISO 11058.

Maria Graça Alfaro Lopes^(a,b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

^(b) Laboratório Nacional de Engenharia Civil

Publicado em: *Relatório do Laboratório Nacional de Engenharia Civil - 01, Proc.º 054/18/12650, Janeiro 2001*

No presente relatório descreve-se o trabalho desenvolvido no âmbito do Projecto PRAXIS XXI, Programa 3/3.1/CEG/2598/95, relativamente à determinação das características de permissividade de geotêxteis e produtos afins através da norma EN ISO 11058. O objectivo do trabalho consistia em alterar o equipamento existente, de maneira a poder realizar-se os ensaios segundo a norma europeia EN ISO 11058 e verificar se existiriam limitações à sua aplicação. O trabalho experimental desenvolvido permitiu retirar as seguintes conclusões: a medida da perda de carga com piezómetros é menos precisa comparativamente com a efectuada com o manómetro diferencial (sobretudo para geotêxteis com maior permissividade), pelo que se deve dar preferência a esta última; o equipamento (após remodelação) não permitiu a determinação do Índice de Velocidade (VI_{H50}) quando o seu valor foi superior a 145 mm/s, mas até 80mm /s os resultados obtidos têm uma precisão semelhante à dos outros laboratórios europeus. Constrains on the source of the 1755 Lisbon earthquake provided by MSC

Data on the Marquês de Pombal thrust

Baptista M A^(a,b), Miranda J.M.^(b), Matias L.^(b), Ribeiro A^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

^(b) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa

^(c) LATEX – Laboratório de Tectónica Experimental

Publicado em: *Geophysical Abstracts, CD, March 2001(NH8, Oral Programme)*

The tectonic source of 1755 Lisbon earthquake and associated tsunami was investigated through high resolution, multichannel, vertical

incidence seismic survey, under the framework of bigsets project. The main results of that survey show: the existence of a diffuse plate boundary extending 200 km south of the gorringe bank and the existence of active tectonics focused along the southern continental slope of Portugal (zitellini et al., 1999). The geological and geophysical constrains provided by the evaluation of bigsets data provided tentative parameters for the earthquake mechanism: rupture length of 200 km; mean dip 30; thickness of schyzosphere 65 km and a slip dislocation of the order of 20 m to 30 m. with those data hydro-dynamical modelling of the associated tsunami was performed using time software (iugg/ioc, 1997). the main conclusions of this study are: the source of the 1755 Lisbon earthquake must be located along the western iberian margin as proposed in Baptista et al. (1998); the thrust of Marquês de Pombal is part of the source for the 1755 Lisbon earthquake; however, even the complete rupture of that segment can not account for the whole seismic energy needed to justify both the earthquake ($m=8.7$) and the observed tsunami. The rupture of the Marquês de Pombal segment is able to reproduce most of the historical tsunami data along the west coast of Portugal. Along the Gulf of Cadiz, Morocco and Madeira simulations are clearly below the observations. Another segment, probably located s/sw of Marquês de Pombal is needed to justify observed data along the Gulf of Cadiz, Madeira and Porto Santo islands.

PORTUGAL: QUE QUALIDADE QUEREMOS TER?

Pedro Lopes Mendonça^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Fórum Recursos Humanos 2002* *Culturgest*, 18 e 19 de Abril de 2002

Os desafios para a competitividade portuguesa: Constitui já um lugar comum dizer que a economia portuguesa tem que ser competitiva pelo lado do BOM e não pelo do BARATO. As exigências deste novo padrão de competitividade, obrigam a uma grande mudança de mentalidades: grande esforço em matéria de educação de base da população, de formação profissional, de interacção entre as empresas e o novo sistema de investigação e desenvolvimento e de capacidade de pôr de pé

projectos empresariais assentes na inovação, na qualidade e numa capacidade diferente de relacionamento, com os mercados. O cenário geral empresarial português está longe de ser o ideal para poder responder a estes desafios. Tão pouco o panorama da formação em Portugal é o mais adequado. **Os desafios para a Qualidade em Portugal:** Os principais referenciais da mudança que a recente Norma ISO 9001/2000 introduziu no processo da Certificação em Qualidade, demonstram que não se trata de simples evolução em relação às regras anteriores e sim de uma revolução: - os aspectos comportamentais passam a estar no cerne do processo; - as competências relacionais, transversais ou chave são decisivas; - a abordagem de Processo em detrimento da abordagem por funções e a melhoria contínua, exigem uma atitude de incomodidade permanente e deve nortear a prática diária da gestão, do topo à base; - ninguém fica de fora na prática da qualidade; - a liderança tem que ser muito mais responsável porque se mede pelo exemplo, nomeadamente na definição de objectivos; - o que passa a contar são os resultados e não a "burocracia dos papeis". Quer isto dizer que, muitas das cerca de 2.000 empresas actualmente certificadas, vão ter de fazer um enorme esforço de formação para conseguirem a renovação dessa certificação. Contudo, não é nas actuais Empresas Certificadas que está o cerne do problema. O problema está nas 150.000 pequenas empresas que o não estão. Como conseguir que as empresas se especializem em qualidade, quando temos baixos níveis de formação em gestão para os dirigentes e quadros intermédios e muito baixos níveis de instrução para os executantes? Como conseguir que as empresas percebam que têm de investir na formação, se sintam estimuladas para aprender a aprender e façam "crescer" os colaboradores? Como conseguir que as empresas se adaptem aos novos desafios do paradigma das *TI*? Como conseguir que se encurte a distância hierárquica e aumente o envolvimento dos colaboradores, para assim se obterem melhorias sustentadas e progressivas de qualidade? Nesta comunicação apresentam-se alguns contributos para a resposta a estas questões.

RELAÇÕES ACTIVIDADE-ACIDEZ EM ZEÓLITOS: UM ESTUDO TEÓRICO E EXPERIMENTAL

**Xueqin Wang^(1,2); M.A.N.D.A. Lemos⁽¹⁾; Francisco Lemos⁽¹⁾; Carla Costa^(1,3),
Fernando Ramôa Ribeiro⁽¹⁾**

⁽¹⁾ Grupo de Zeólitos, Centro de Engenharia Biológica e Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal.

⁽²⁾ Institute of Industrial Catalyst, Dalian University of Technology, 158 Zhongshan Road, 116012 Dalian, China.

⁽³⁾ Departamento de Engenharia Civil, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Instituto Politécnico de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1049-014 Lisboa.

Publicado em: *Actas do 5º Encontro da Divisão de Catálise da Sociedade Portuguesa de Química, pp. 45-46, Leiria, Portugal, Maio 2001.*

O objectivo deste trabalho é mostrar que há uma relação clara entre a actividade catalítica e a acidez, no caso da catálise ácida por zeólitos Y e que esta relação tem apoio teórico por cálculos de química quântica em centros ácidos modelo. O estudo apresentado é centrado na transformação do eteno e do propeno sobre zeólitos ácidos Y e USY.

MUST CONGESTION BE PRICED? HOW TO QUANTIFY AND DEAL WITH THIS PROBLEMATIC URBAN IMPAIRMENT

Faustino Gomes^(a) Paulo Martins^(b)

^(a) TIS.pt Consultoria em Transportes, Inovação e Sistemas, AS

^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Actas da conferência TRISTAN IV – Triennial Symposium on Transportation Analysis, p153-158, São Miguel, Açores, Junho 2001.*

Congestion is perhaps the most well known impairment resulting from transport systems in our modern societies, particularly when we are referring to metropolitan areas and big cities. Almost everyone has already experienced the nasty effects of being stuck into the traffic wasting precious working or leisure time. The aim of this paper is twofold: first, to clarify the nature of congestion as a very specific type of externality, presenting the theoretical background subjacent to the feasible internalisation policies for practical implementation. Second, to develop and present a modular methodology to quantify the social costs

and social welfare due to congestion, under several different pricing/taxation scenarios. Main characteristics of the methodology are: it's modularity, the use of Logit models to simulate partial Demand Curves (DC) and the possibility to use probabilistic (discrete and continuous) Values of Time (VOT) instead of the traditional average weighted values in use.

ACTIVITY-ACIDITY RELATIONSHIP IN Y ZEOLITE: AN EXPERIMENTAL AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY

Xueqin Wang^(1,2); M.A.N.D.A. Lemos⁽¹⁾; Francisco Lemos⁽¹⁾; Carla Costa^(1,3),
Fernando Ramôa Ribeiro⁽¹⁾

⁽¹⁾ Grupo de Zeólitos, Centro de Engenharia Biológica e Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal.

⁽²⁾ Institute of Industrial Catalyst, Dalian University of Technology, 158 Zhongshan Road, 116012 Dalian, China.

⁽³⁾ Departamento de Engenharia Civil, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Instituto Politécnico de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1049-014 Lisboa.

Publicado em: *Stud. Surf. Sci. Catal. “ Zeolites and mesoporous materials at the dawn of the 21st century”*, A. Galarneau, F. Di Renzo, F. Fajula, J. Vedride (Eds.), 135 (2001) pp. 259 (CD-ROM 15-P-16).

The aim of the present paper is to show that there is a clear relation between the catalytic activity and the acidity for acid catalysis using Y zeolites and that relationship has theoretical support through quantum chemical calculations on model acid sites. The study presented is centred on the transformation of ethene and propene over acidic Y and USY zeolites.

PORTUGUESE EXPERIENCE IN CONSTRUCTION OF MUNICIPAL SOLID WASTE LANDFILL LINER SYSTEMS

Maria Graça Alfaro Lopes^(a), Maria de Lurdes Lopes^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

^(b) Faculdade de engenharia da universidade do Porto

Publicado em: *Proceedings of the Fifteenth International Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering, Volume 3, Istanbul, Agosto 2001, pg. 1985*

An important effort has been made in Portugal during the last few years in order to change the waste management policy. Open dumps have been progressively closed whereas several new sanitary landfills have been constructed. In this process, geosynthetics played an important role. However, the construction of appropriate liner systems for the new municipal solid waste landfills, and particularly the application of geosynthetics, required new geotechnical approaches in design and construction, which were, until recently, uncommon in Portugal. This paper focuses its attention on the preliminary experience collected from the use of geosynthetics and geomembranes in the construction of different Portuguese MSW landfills in recent years. The main design and construction requirements adopted, the legislation followed, the construction quality assurance plan prepared by national laboratory of civil engineering (LNEC) and, finally, the main construction problems detected are reported in this paper.

THE ATTENUATION LAWS FOR THE 1755 LISBON EARTHQUAKE AND ITS CONSEQUENCES FOR SEISMIC HAZARD EVALUATION IN PORTUGAL

M A. Baptista^(a,b); J.M. Miranda^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

^(b) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa

Publicado em: *IAGA_IASPEI Joint Scientific Assembly, 19-31 August 2001, Hanoi - Vietnam. Book of Abstracts. p334*

The 1755.11.01 Lisbon earthquake was felt strongly on Portugal, Spain and Morocco. The intensity at the epicentre estimated from historical data is XI (MSK) and its magnitude was inferred as 8.75 (Gutenberg e Richter, 1949). (...) The earthquake generated a tsunami which magnitude was estimated by Abe (1989) as $M_t = M_w = 8.5$, based on the tsunami run up data observed along the Iberian coast. Due to the large earthquake's magnitude, it was felt in a large number of localities, along the Iberian Peninsula and Morocco and its effects are described in a large number of historical documents (Baptista et al, 1998). Macro seismic

Intensity maps were published for Portugal, Spain and Morocco separately and several attenuation studies were made (Machado, 1966, Mezcuca, 1982, Oliveira, 1987, Levret, 1991). All these studies were based on the assumption that the 1755 earthquake was generated in the Goringe Bank. Hydrodynamic simulations of the 1755.11.01 Lisbon tsunami (Baptista et al, 1998, 1999) and recent MCS studies along the Portuguese western margin (Zitellini et al, 1999) showed that the location of the source area is probably located much closer to the Portuguese shore. So, there is a need to study the implications of this location in what concerns the attenuation laws for SW Iberia and the seismic hazard evaluation.

WAVE EFFECTS ON SHIPS MOORED AT FIGUEIRA DA FOZ HARBOUR

João Alfredo Santos⁽¹⁾, Maria da Graça Neves⁽¹⁾, Conceição J. E. M. Fortes⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratório Nacional de Engenharia Civil

Palestra em: *4th Internacional Symposium on Wave Measurement and Analysis, S. Francisco, California, 2 a 5 de Setembro (1 "poster")*.

The Figueira da Foz harbour is located at the mouth of the Mondego River in the West coast of Portugal. Two shore-connected breakwaters that, due to their layout, have a quite poor performance shelter it. In fact, some of the incident waves cause large movements in the ships moored at the general cargo quay. The breakage of mooring lines is a quite common accident there. This paper presents the methodology employed and summarizes the results obtained in both the wave penetration study when the harbour basin is dredged up to -7.00 m C.D. and the study of the wave effects on the behaviour of a ship moored at the general cargo quay.

O ENSINO DE DINÂMICA DE SISTEMAS RECORRENDO A SIMULADORES SIMPLES.

Francisco Lemos⁽¹⁾, Filipe Freire⁽¹⁾, Hugo Vale⁽¹⁾, Carla Costa^(1,2), Carla Pinheiro⁽¹⁾, José Manuel Lopes⁽¹⁾, Fernando Ramôa Ribeiro⁽¹⁾

⁽¹⁾ Grupo de Zeólitos, Centro de Engenharia Biológica e Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal.

⁽²⁾ Departamento de Engenharia Civil, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Instituto Politécnico de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1049-014 Lisboa.

Publicado em: *Actas do 8th International Chemical Engineering Conference, CHEMPOR'2001, pp. 171-178, Aveiro, Portugal, Setembro 2001.*

Neste trabalho foi analisada a possibilidade de utilização de diversas ferramentas para permitir a utilização simples de modelação de sistemas dinâmicos com complemento no ensino teórico e prático em cadeiras de dinâmica de sistemas e controlo de processos, em particular no que refere à relação entre a função de transferência e o comportamento, tanto em cadeia aberta como em cadeia fechada, do sistema que esta descreve. Para cumprir estes objectivos foi desenvolvido um programa de simulação (em Visual Basic 4 © Microsoft), a que se deu o título de “Descontrolado”, que permite simular sistemas descritos por funções de transferência de primeira e segunda ordem, com ou sem dinâmica de entrada e considerando, ou não, atraso no tempo.

CONTROLE POR PILOTO AUTOMÁTICO DO MODELO NUMÉRICO DO LNEC PARA COMPORTAMENTO DE NAVIOS EM MANOBRA

João Alfredo Santos, Manuel Marcos Rita

Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Av. do Brasil, 101, 1700-066 Lisboa

Palestra em: *2as. Jornadas Portuguesas de Engenharia Costeira e Portuária, Sines, 17 a 19 de Outubro (3 comunicações).*

O simulador numérico do comportamento de navios em manobra desenvolvido pelo LNEC, SIMNAV, tem sido normalmente utilizado na verificação das dimensões propostas para canais de acesso a portos. Isto é, para um traçado em planta proposto e para um conjunto de situações de teste seleccionadas, são realizadas várias viagens por operadores experimentados procedendo-se, depois, ao tratamento estatístico dos desvios entre as trajectórias e o eixo do canal.

Contudo, este procedimento não é o mais adequado quando se pretende apenas comparar diferentes traçados para a travessia da mesma zona. Nesse caso, é mais interessante o controle do modelo numérico por um piloto automático pois, para os valores dos parâmetros de controle do navio mais adequados ao cenário em estudo, o traçado com menores desvios deve ser o melhor do ponto de vista da navegação.

Nesta comunicação descreve-se o piloto automático desenvolvido no LNEC para controle do modelo SIMNAV, bem como a sua aplicação à análise de seis traçados propostos para a travessia da barra do Douro.

FERRAMENTAS DE INSPECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE OBRAS DE PROTECÇÃO PORTUÁRIA

Luis Gabriel Silva^(a), João Alfredo Santos^(a), Maria da Graça Neves^(a), Carlos Silvestre^(b), Paulo Oliveira^(b), Antonio Pascoal^(b)

^(a) Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Av. do Brasil, 101, 1700-066 Lisboa

^(b) DSOR/ISR – IST, Av. Rovisco Pais, 1, Torre Norte, Piso 8, 1049-001 Lisboa

Palestra em: *2as. Jornadas Portuguesas de Engenharia Costeira e Portuária, Sines, 17 a 19 de Outubro*

Esta comunicação tem como objectivo descrever o trabalho a desenvolver por uma equipa do LNEC e do IST com duas vertentes complementares:

- utilização de veículos autónomos em conjunto com os últimos avanços da tecnologia de posicionamento, navegação e controlo para o desenvolvimento de metodologias e ferramentas de inspecção precisa e eficaz da geometria de quebra-mares de talude;
- desenvolvimento de metodologias de diagnóstico do estado de risco da estrutura que, a partir de medidas da evolução dos quebra-mar ao longo dos anos e com base em resultados de ensaios em modelos reduzidos, permita ajudar na tomada de decisão de quando e como fazer intervenções na estrutura.

Assim, no âmbito deste trabalho será desenvolvido um instrumento para a caracterização da geometria, quer da parte parte submersa, quer da parte emersa, de quebra-mares de talude. A aplicação destas técnicas na inspecção de quebra-mares irá pôr à disposição dos técnicos meios para acompanhar a evolução temporal destas estruturas, permitindo localizar

com precisão as áreas mais debilitadas. O volume de dados resultante das inspecções da estrutura (parte emersa e imersa) permitirão a realização do diagnóstico, que será efectuado a partir quer da experiência anterior do LNEC neste domínio, quer de resultados obtidos em ensaios em modelo reduzido.

SICNAP – SISTEMA INTEGRADO DE CONTROLE DA NAVEGAÇÃO PORTUÁRIA

J. M. Afonso Covas^(a), José E. Sanguino^(b), José Brazuna Fontes^(c), João Alfredo Santos^(a)

^(a) Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Av. do Brasil, 101, 1700-066 Lisboa

^(b) Instituto de Telecomunicações – IST, Av. Rovisco Pais, 1, 1049-001 Lisboa

^(c) Administração do Porto de Sines SA, Apartado 16, 7520-953 Sines

Palestra em: SICNAP – Sistema Integrado de Controlo da Navegação Portuária

O desenvolvimento dos sistemas de navegação baseados em informação fornecida por satélite, tais como o GPS, que na sua versão diferencial atinge uma precisão considerável, permite, em conjugação com um sistema de informação geográfica e outros dados complementares, o desenvolvimento de sistemas de controlo de tráfego marítimo (VTS) eficazes e relativamente económicos.

Apresenta-se nesta comunicação o protótipo de VTS desenvolvido no âmbito do projecto NATO PO-NAVIGATION para o porto de Sines. Este sistema, a instalar em terra, deve controlar permanentemente todo o tráfego partindo da informação da posição dos navios, obtida a partir de “transponders” baseados em receptores de GPS e transmitida em tempo real pelos navios, e fornecendo aos pilotos informação relativa às tendências das respectivas trajectórias e rumos.

Embora o protótipo de VTS tenha sido desenvolvido tendo em vista a sua aplicação no porto de Sines, a sua arquitectura é bastante flexível permitindo a sua utilização em outros portos, independentemente da configuração dos mesmos ou do seu tráfego marítimo.

Atenuação da Intensidade Sísmica na Península Ibérica

M.A.Baptista; J.M. Miranda

M.A.Baptista^(a,b); J.M. Miranda^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

^(b) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa

Publicado em: *Sísmica 2001, 5º Encontro Nacional de Sismologia e Engenharia Sísmica, pp49-56, Outubro de 2001.*

A ocorrência de sismos de forte magnitude na Península Ibérica é descrita em documentos históricos desde o ano 60BC (Mendonça, 1758; Galbis Rodrigues, 1932, GPSN (1991). Os epicentros destes eventos, localizam-se dentro duma vasta região que se estende desde a Planície Abissal do Tejo (a Norte) até ao Banco do Guadalquivir (margem sul da Ibéria).

Os modelos de atenuação da intensidade sísmica para eventos de magnitude moderada a forte baseiam-se essencialmente no estudo do sismo de magnitude 7.3 ocorrido a 28 de Fevereiro de 1969, com epicentro a sul do Banco do Gorringe na Planície Abissal da Ferradura.

Recentemente Carrilho e Oliveira (1997) apresentaram um modelo de atenuação da intensidade sísmica, para Portugal baseado na análise de registos digitais da rede sismográfica nacional, para sismos de fraca magnitude (2.9-4.8) e distâncias focais variando entre 40km e 400 km.

O PROJECTO DYNASEIS

M.A.Baptista^(a); C.S.Oliveira^(b); A.Afilhado^(a); A.C.Costa^(a,c); M.Vasques^(a)

^(a) DEC - Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

^(b) DEC - Instituto Superior Técnico

^(c) LNEC - Laboratório Nacional de Engenharia Civil

Publicado em: *Sísmica 2001, 5º Encontro Nacional de Sismologia e Engenharia Sísmica, pp519-524(SPES), Outubro de 2001*

O projecto Dynaseis – Dynamic Behaviour of Re-inforced Concrete Structure Under Seismic Load, tem como objectivo a monitorização contínua de um edifício de 15 a 20 andares na zona do Parque das Nações em Lisboa. Na fase experimental será instrumentado um edifício do Campus do ISEL de forma calibrar a rede de instrumentos e fixar possíveis níveis de trigger. A ocorrência de sismos de moderada e forte magnitude pode causar danos irreversíveis nas estruturas ou mesmo o

colapso. A nova zona de habitação e comércio situado na área do Parque das Nações em Lisboa, encontra-se numa zona aluvionar e de elevado nível freático. Estas condições podem de solo podem amplificar irreversíveis nas estruturas ou mesmo o colapso. A instrumentação do edifício consiste num conjunto de 6 acelerómetros uniaxiais, de 24 bits, colocados no piso térreo, num piso intermédio e no topo do edifício. Em cada um destes pisos serão medidas acelerações NS e EW. Este tipo de geometria permitirá a medição experimental das frequências próprias da estrutura. O movimento do solo na superfície livre, na área adjacente à estrutura será medida, utilizando um acelerómetro de 3 componentes (24bits). A monitorização contínua de uma estrutura deste tipo é uma experiência pioneira em Portugal, permitindo estimar a interacção solo estrutura numa zona de construção residencial e comercial recente.

QUANTITATIVE CORRELATION BETWEEN ACIDITY AND CATALYTIC ACTIVITY IN ZEOLITIC MATERIALS

Carla Costa^(1,2); José Manuel Lopes⁽¹⁾; Francisco Lemos⁽¹⁾; Fernando Ramôa Ribeiro⁽¹⁾

⁽¹⁾ Grupo de Zeólitos, Centro de Engenharia Biológica e Química, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal.

⁽²⁾ Departamento de Engenharia Civil, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Instituto Politécnico de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1049-014 Lisboa.

Publicado em: *Actas do Simpósio Materia 2001, Instituto de Investigaciones en Materiales, Cidade do México, México, Outubro 2001.*

The Brønsted relationships describe the relation between the rate of a homogeneously acid catalysed reaction and the acid strength of the catalyst. A similar relation for heterogeneous catalysis, namely to the zeolites which are materials very useful in acid catalysis, has been sought for a long time by researchers working in this field. The greatest difficulty in obtaining this relation is due to the fact that the surface of the zeolites does not have a unique acid strength, but rather a distribution of acid strengths, making it difficult to correlate catalytic activity with the observed acidity measurements.

The acid site strength distribution on the surface of several Y [1,2] and ZSM-5 [3] zeolites was estimated applying a digital deconvolution method to the ammonia temperature-programmed desorption (TPD) curves. From this method the amount of sites, q_{EO}^i , having an acid strength E^i are obtained. These results were then quantitatively correlated with the experimental catalytic activity for transformation of n-heptane and light olefins by means of a Brönsted-type equation, $A_C = \sum_i q_{EO}^i a e^{bE^i}$ where α and β are characteristic of the reaction

under study. Using a least-squares technique, the values of α and β were estimated and a good correlation was obtained (Figure 1).

As conclusions one can say that: 1) the deconvolution method of the ammonia TPD curves developed is suitable to characterise the acidic zeolite surfaces which possesses a strength distribution of acid sites and with acid sites chemically different;

2) the activation energy for ammonia desorption can be used as a acid practical scale for zeolites samples with a catalytic meaning;

3) the Brönsted relations hold to heterogeneous acid catalysis by zeolites with different structures and for the

the transformation of several hydrocarbons, in a similar way used for homogeneous catalysis. The computations involved in the establishment of these relations are complex; nevertheless they are feasible within the power of modern desktop computers and at the reach of experimental researcher.

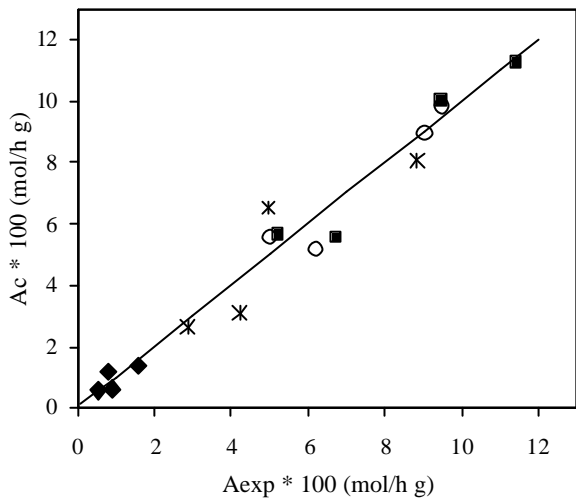


Figure 1 - Plot of the calculated, A_c , versus experimental, A_{exp} , activity values for the transformation of \blacklozenge - ethene, $*$ - propene, \circ - 1-butene and \blacksquare - iso-butene over HNaUSY zeolites.

DIMENSIONAMENTO DE UMA PAREDE MOLDADA COM RECURSO AO CÁLCULO AUTOMÁTICO DE ESTRUTURAS

Jorge Reis de Barros^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *1.º Workshop de Cálculo Automático de Estruturas, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Outubro 2001.*

A utilização generalizada dos programas de cálculo automático, baseados no métodos dos elementos finitos, é uma realidade e a sua aplicação em geotecnia não é excepção. Com este trabalho pretende-se apresentar um caso prático de projecto de dimensionamento de uma estrutura de contenção flexível utilizando o programa de cálculo automático *PLAXIS*. Trata-se de uma estrutura de contenção flexível em parede moldada apoiada em vários níveis de ancoragens provisórias pré-esforçadas. O estudo refere-se a uma escavação a ser realizada para a execução de um conjunto de caves para estacionamento, que se desenvolvem em todo o quarteirão localizado na Vila Expo – PP4 – Parcela 4.42, no Parque das Nações em Lisboa. A modelação numérica pelo método dos elementos finitos recorrendo ao programa de cálculo automático permitiu, através de análises tensão-deformação em estado de deformação plana, modelar de uma forma mais realista toda a sequência construtiva da parede moldada desde as diferentes fases de escavação e aplicação de pré-esforço, à fase definitiva, já com as ancoragens provisórias desactivadas.

O ISEL E O CAE. DESENVOLVIMENTOS E PERSPECTIVAS FUTURAS

Paulo Martins^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Actas do Primeiro Workshop de Cálculo Automático de Estruturas do ISEL, Lisboa, Outubro 2001.*

Comunicação institucional de apresentação do Laboratório de Mecânica Computacional do DEC e do grupo de trabalho que desenvolve os projectos em torno do mesmo. Referem-se, entre outros aspectos, a definição do âmbito de actuação e principais metas. A saber, na área do ensino, pedagogia e investigação. Descrevem-se também as metas e

acções futura que o grupo de trabalho se propõe executar. Nomeadamente, acções de divulgação da mecânica computacional e projectos de desenvolvimento de software de cálculo automático de estruturas no próprio ISEL.

INSPECÇÃO E ESTUDOS DE REABILITAÇÃO DA PONTE DA BARRA DO KWANZA EM ANGOLA

Armando Rito^(a); Cristina Machado^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: Jornadas de Estradas e Pontes dos Países de Língua Portuguesa – Comunicações II – Lisboa 13 a 16 de Novembro 2001.

Em 1990, um dos tirantes de retenção da ponte da Barra do Kwanza, construída entre 1970 e 1975, rompeu, levando a obra à beira do colapso. Na altura foi feito um reforço provisório que permitiu manter a obra em funcionamento. Nesta comunicação apresenta-se uma breve descrição da obra, desse trabalho de reparação, do estado actual da obra e da solução preconizada para a sua reabilitação.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE MANOBRAS DE NAVIOS

João Alfredo Santos⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratório Nacional de Engenharia Civil

Palestra em: Seminário “A Hidroinformática em Portugal”, LNEC, 15 a 16 de Novembro

A utilização de simuladores de manobra de navios como ferramenta de apoio ao projecto de bacias portuárias e canais de acesso a portos é uma prática bem estabelecida. Estes simuladores, especialmente na sua versão mais simples, os chamados simuladores RADAR, em que a representação da posição do navio se limita, na maioria dos casos, a uma vista em planta, isto é, algo semelhante ao que se veria no visor de um RADAR, têm sido utilizados na definição do traçado em planta e da secção transversal de canais de acesso a portos, bem como no dimensionamento de bacias de manobra e até no estabelecimento das

condições de navegação de um canal, por exemplo: na definição de valores máximos admissíveis da velocidade do navio, da velocidade do vento ou da altura significativa da agitação incidente no canal.

No LNEC, existe desde 1989 um simulador de manobras de navios, SIMNAV, que tem sido utilizado com êxito em vários projectos. Partiu-se de um modelo para a verificação das características de manobrabilidade de navios na fase de projecto, tendo-se obtido um modelo que leva em conta o efeito da agitação marítima, do vento e das correntes, bem como da navegação em águas pouco profundas.

Nesta comunicação, descrevem-se o pacote de programas resultante da evolução desse simulador de manobras e os procedimentos de aplicação desta ferramenta num caso de estudo real, focando-se a condução de ensaios com o simulador e a análise dos resultados.

A MULTIDISCIPLINARY APPROACH FOR THE INVESTIGATION OF TSUNAMIGENIC AND SEISMOGENIC STRUCTURES: THE SOURCE FOR THE 1755 LISBON EARTHQUAKE

Terrinha, P.⁽¹⁾, Pinheiro, L.⁽¹⁾, M. Matias, L.⁽²⁾, M, Henriët, J.⁽³⁾, Ivanov, M. ⁽⁴⁾, Shaskin, P.⁽⁴⁾, Zitellini, N.⁽⁵⁾, Baptista, M. A.⁽⁶⁾, Ribeiro, A.⁽⁷⁾, Mendes-Victor, L. A.⁽²⁾

⁽¹⁾ IGM – Dept. de Geologia Marinha, Portugal

⁽²⁾ Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa

⁽³⁾ Ghent Univ. , Belgica

⁽⁴⁾ Moscow State Univ., Unesco, Centre of Marin Geology and Geophysics

⁽⁵⁾ Istituto di Geologia Marina, Bolonha, Itália

⁽⁶⁾ Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Portugal

⁽⁷⁾ Lattex, Dept. Geologia da F.C.U.L., Portugal

Publicado em: *EOS, Trans. 82(47) Fall Meet. Suppl. Abstract S51B-0611, Dec. 2001*

The southwestern margin of Iberia has been the locus of major earthquakes and tsunamis. The last one, the 1755 Lisbon earthquake with an estimated magnitude of 8.5, caused severe destruction in Portugal, Spain and Morocco. The "Marquês de Pombal" thrust (MPT), which has been recently identified, is thought to be the probable source for this event and has been studied by seismic methods and sampling under the European BIGSETS project. Preliminary analysis of this dataset showed that the length of the recognized fault and flexure (60 km) is not enough

to justify the historical information on the tsunami and the seismic energy released. The MPT and other tectonically active structures that are also recognized in the area were investigated in July 2000 during the TTR10 cruise (Training Through Research, UNESCO/IOC) using single channel seismic profiles, 3.5 kHz seabottom profiler, 10 kHz OKEAN long range sidescan sonar, 30 kHz ORETECH deep towed sidescan sonar and high resolution seabottom profiler. These data allowed the definition of new active faults and the establishment of morphological criteria for the classification of active faults in the study area. Landslides associated with the activity of the Marquês de Pombal fault, which possibly generated the 1755 Lisbon earthquake, and other areas with clear signs of existence gravitational slides were mapped. A slope to basin sedimentary system comprising 21 turbidite ridges up to 20 km long has been mapped and described. Bathymetric features in the seafloor that were previously ascribed to a tectonic origin were identified as turbidite ridges/channels on the high resolution seismic profiles. It is shown that the Pereira de Sousa fault, its plateau and the Príncipe de Avis plateau, all north of the MPT, are experiencing uplift according to sedimentary and morphological criteria. The source for the 1755 Lisbon earthquake and tsunami must be complex, comprising several tectonically active structures that merge in depth. The hydro-dynamical modeling of some realistic hypothesis for this type of fault interaction still fail to account for the high run-up observed in Cadiz. The existence of active tectonics focused along the southern continental slope of Portugal may be interpreted as a sign that a recent change in the plate boundary configuration has taken place in the eastern end of the Azores-Gibraltar Fault Zone, with a possible transition of the West-Iberia margin from passive to active.

NEW EVIDENCE FOR THROUGH-SPACE TRANSMISSION OF SUBSTITUENT EFFECTS IN BENZENE DERIVATIVES

Manuel A. P. Segurado ^(a) ; **João Carlos R. Reis** ^(b) ; **Jaime D. Gomes de Oliveira** ^(c)

^(a) Faculdade de Farmácia and Centro de Electroquímica e Cinética, Universidade de Lisboa, 1649-003 Lisboa, Portugal

^(b) Departamento de Química e Bioquímica, Centro de Electroquímica e Cinética, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1749-016 Lisboa, Portugal

^(c) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa and Centro de Electroquímica e Cinética, 1949-014 Lisboa, Portugal

Publicado em: *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, first published as an Advance Article on the Web 14th December 2001

Electrostatic interaction energies between dipolar substituents and dipolar or charged reaction sites are re-examined. At short interaction distances and given orientations, the point-dipole approximation is shown to introduce important errors. Exact expressions are derived for correcting current equations for both interaction types, including the Kirkwood-Westheimer equation. The parameter *I* for describing *para-meta* ratios of substituent inductive or Electra effects in benzene derivatives is modelled in terms of electrostatic interaction energy. Using the new equations it is shown that parameter *I* can take values smaller or greater than unity, approaching a value of 2 at very large distances. Experimental *I* values are calculated using reliable literature data for the ionisation equilibria of substituted phenylethanoic and 3-phenylpropanoic acids in ethanol-water mixtures. Theoretical *I* values for these reactions are obtained taking into account rotational and conformational changes in the corresponding carboxylate anions. From the good agreement between experimental and theoretical *I* values, it is concluded that there is through-space transmission of substituent effects in benzene derivatives.

OBSERVAÇÃO E ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DIFERIDO DE PONTES DE BETÃO

Luís Miguel Pina de Oliveira Santos, Eq. Prof. Adjunto do ISEL

Doutoramento em: *Área Científica de Engenharia Civil*

Grau concedido por: *Instituto Superior Técnico – Universidade Técnica de Lisboa*

Orientadores: *Francisco Virtuoso, Prof. Associado do IST, João Almeida Fernandes, Eq. Prof. Coordenador do ISEL*

Provas Concluídas em: *Outubro 2001*

O presente trabalho pretende contribuir para um melhor conhecimento do comportamento diferido do betão e das consequências que a sua variabilidade induz no comportamento estrutural das pontes.

Para este efeito desenvolveu-se um modelo para a análise do comportamento estrutural ao longo do tempo que considera os modelos de comportamento instantâneo e diferido dos materiais propostos pelo MC90 e incluídos no EC2.

Apresenta-se uma síntese dos procedimentos adoptados pelo LNEC na observação de pontes de betão armado pré-esforçado, indicando-se alguns contributos para a melhoria das técnicas e equipamentos utilizados na medição de diversas grandezas, tais como deslocamentos, extensões, forças e temperaturas.

Propõe-se uma metodologia para caracterizar a variabilidade do comportamento diferido do betão que envolve o tratamento estatístico dos valores experimentais do módulo de elasticidade, das extensões de retracção e dos coeficientes de fluência do betão ao longo do tempo. Esta metodologia é aplicada aos valores experimentais provenientes das pontes de S. João, Guadiana, Freixo e Miguel Torga, observadas pelo LNEC, os quais são comparados entre si e com os valores previstos pelo EC2.

É efectuada uma análise do comportamento diferido das quatro pontes acima referidas utilizando o modelo de comportamento de comportamento estrutural desenvolvido e considerando a variabilidade das propriedades do betão, recorrendo-se para este efeito ao método de Monte Carlo.

MATTER EFFECTS IN THE D0-D0BAR SYSTEM

João P. Silva^(a) ^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) SLAC, Stanford University, USA.

Publicado em: *Physical Review D*, vol. 63, pp. 014002, 2001.

We discuss the impact of matter effects in the D0-D0bar system. We show that such effects could, in principle, be measured, but that they cannot be used to probe the mass difference x_D or the lifetime difference y_D . This occurs because the mixing effects and the matter effects decouple at short times. We also comment briefly on the B systems. ently, the Babar and Belle collaborations have reported their first measurements of the CP-violating asymmetry in $B_d \rightarrow \psi K_S$, and more precise results will follow soon. We discuss what a future evidence for small $\sin(2\beta)$ could mean, contrasting the usual possibility of new physics in the B_d system, with the interesting alternative that the new physics effects are confined to the kaon system.

IMPLICATIONS OF THE POSSIBILITY THAT SIN(2 BETA) IS SMALL

João P. Silva^(a) ^(b); Lincoln Wolfenstein^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) SLAC, Stanford University, USA ; ^(c) Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA.

Publicado em: *Physical Review D*, vol. 63, pp. 056001, 2001.

Recently, the Babar and Belle collaborations have reported their first measurements of the CP-violating asymmetry in $B_d \rightarrow \psi K_S$, and more precise results will follow soon. We discuss what a future evidence for small $\sin(2\beta)$ could mean, contrasting the usual possibility of new physics in the B_d system, with the interesting alternative that the new physics effects are confined to the kaon system.

FUNDAMENTOS DA REOLOGIA DOS MATERIAIS MESOMORFOS

C. R. Leal^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Reologia e suas Aplicações Industriais, Cap. 2, pp. 361-380, livro coordenado por A. G. Castro, J. A. Covas e A. C. Diogo, editado pelo Instituto PIAGET, 2001.*

Neste capítulo, faz-se uma breve introdução às propriedades que caracterizam os materiais mesomorfos, nomeadamente os cristais líquidos e os polímeros líquido-cristalinos. Apresentam-se os principais comportamentos reológicos observados experimentalmente em sistemas liotrópicos e termotrópicos, e faz-se a ligação com a interpretação teórica oferecida por duas teorias baseadas no modelo contínuo (uma para cristais líquidos e outra para polímeros líquido-cristalinos). Sucintamente descrevem-se algumas das aplicações científicas e industriais destes materiais.

The **INFLUENCE** of Polymer Molecular Weight on the First Normal Stress Difference and Shear-Viscosity of LC Solutions of Hydroxypropylcellulose

A. F. Martins^(a); C. R. Leal^{(a) (b)}; M. H. Godinho^(a); F. Fried^(c)

^(a) Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa; ^(b)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(c) Université Sophia Antipolis, Nice, França.

Publicado em: *Molecular Crystals and Liquid Crystals, vol. 362, pp. 305, 2001.*

The first normal-stress difference $N_1(\dot{\gamma})$ and shear viscosity $\eta(\dot{\gamma})$ have been measured for liquid crystalline solutions of HPC in acetic acid (AA) as functions of the shear rate $\dot{\gamma}$ and the molecular mass of HPC. The measurements were done over four decades in $\dot{\gamma}$, for two samples of HPC with $M_w = 60,000$ and $100,000$ (Klucel E e L respectively) and solution concentration $c=37\%$ ($c>c^*$). $N_1(\dot{\gamma})$ is observed to change from positive to negative and again to positive, as the shear rate $\dot{\gamma}$ increases. The $\dot{\gamma}$ values at which N_1 changes sign depend on M_w . The viscosity $\eta(\dot{\gamma})$ shows a small Newtonian plateau at low shear rates and a strong

shear-thinning at higher values of $\dot{\gamma}$, including an “hesitation” similar to one previously observed in LC solutions of PBLG [2]. All these observations are rationalized within the framework of the constitutive equations for liquid crystalline polymers recently proposed by one of us [1]. Expressions for $\eta(\dot{\gamma})$ and $N_1(\dot{\gamma})$ derived from this theory fit very well (quantitatively) to the experimental data and some fundamental viscoelastic parameters of the system are thereby obtained for the first time.

A STUDY OF VARIABILITY OF SUBERIN COMPOSITION IN CORK FROM *QUERCUS SUBER* L. USING THERMALLY ASSISTED TRANSMETHYLATION GC-MS

M. F. Bento^{(a) (b)}, H. Pereira^(c), M. Á. Cunha^{(b) (d)}, A. M. C. Moutinho^(e), K. J. Van Den Berg^(f) and J.J. Boon^(f)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Centro de Física Molecular da Universidade Técnica de Lisboa; ^(c) Centro de Estudos Florestais da Universidade Técnica de Lisboa; ^(d) Instituto Superior Técnico; ^(e) CeFITec da Universidade Nova de Lisboa; ^(f) FOM Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam, Holanda.

Publicado em: *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, vol. 57, pp.45, 2001.

The chemical composition of suberin in cork from *Quercus suber* L. was determined on virgin and reproduction cork from different sites and trees from Portugal. Extractive-free samples were analyzed by pyrolysis-gas chromatography/mass spectrometry in the presence of tetramethylammonium hydroxide (TMAH), which provides *in situ* hydrolysis and (trans)methylation of hydroxyl and carboxyl groups of the suberin monomers. The average chemical monomeric composition of suberin on virgin and reproduction cork is respectively: alkanolic acids 5.1%, 3.3%; α,ω -diacids 11.2%, 10.1%; ω -hydroxyacids 45.0%, 48.1%; alkanols 1.9%, 1.8%; 9,10-epoxy-18-hydroxyoctadecanoic acid 5.9%, 5.8%; 9,10-epoxyoctadecanodioic acid 4.8%, 3.6%; 9,10,18-trihydroxyoctadecanoic acid 7.5%, 10.4%; 9,10-dihydroxyoctadecanedioic 6.1%, 6.8%; ferulic acid 5.8%, 4.5% and glycerol 4.3%, 4.3%. In general, larger variability was found for the suberin monomers in virgin cork. Total content of ω -hydroxyacids or of C18 or C22 compounds is however similar for all samples.

FRAGMENTATION OF SUBERIN AND COMPOSITION OF ALIPHATIC MONOMERS RELEASED BY METHANOLYSIS OF CORK FROM *QUERCUS SUBER* L., ANALYSED BY GC-MS, SEC AND MALDI-FT-ICR-MS

M. F. Bento^{(a) (b)}, H. Pereira^(c), M. Á. Cunha^{(b) (d)}, A. M. C. Moutinho^(e), K. J. van den Berg^(f), J. J. Boon^(f), O. van den Brink^(f) and R. M. A. Heeren^(e)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Centro de Física Molecular da Universidade Técnica de Lisboa; ^(c) Centro de Estudos Florestais da Universidade Técnica de Lisboa; ^(d) Instituto Superior Técnico; ^(e) CeFiTec da Universidade Nova de Lisboa; ^(f) FOM Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam, Holanda.

Publicado em: *Holzforschung*, vol. 55, pp. 487, 2001.

Suberin from extractive-free cork from *Quercus suber* L. was depolymerised by methanolysis using different sodium methanolate (NaOMe) concentrations. 1% and 3% NaOMe completely removed suberin from cork (54%-56% of extractive-free cork), but for lower concentrations there was incomplete solubilisation; with 0.05% NaOMe, only approximately 80% of total suberin was removed. The monomeric composition of the extracts differed significantly: for the 0.05% NaOMe, only alkanolic acids and diacids were found; the yield of α -hydroxyacids increased with reactant concentration, as well as alkanols and ferulic acid.

Results from light scattering, SEC and MALDI-FT-ICR-MS showed that soluble oligomeric fragments containing suberinic acids were present in the methanolysis mixture. The molecular weight of these oligomeric fragments decreased with higher sodium methanolate concentrations.

RUDDLESDEN-POPPER VERSUS PEROVSKITE PHASES IN La-Ca MANGANITES

M. M. Cruz^(a); M. D. Carvalho^(a); A. Casaca^{(b) (c)}; G. Bonfait^{(c) (d)}; F. M. Costa^(a); M. Godinho^(a)

^(a) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(c) Instituto Tecnológico e Nuclear; ^(d) Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa.

Publicado em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 226-230 (1), pp. 800-802, 2001.

Phases with nominal composition $\text{La}_{1.4}\text{Ca}_{1.6}\text{Mn}_2\text{O}_7$, $\text{La}_2\text{Ca}_2\text{Mn}_3\text{O}_{10}$ and $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ were prepared. Magnetisation and magnetoresistance

measurements for the obtained samples as well as a careful structural characterisation indicated that the Ruddlesden-Popper (RP) phases with calcium are not stable. The transition temperatures found for the $n=2,3$ RP phases are, respectively, 170 and 202K.

ANÁLISE DE ONDAS VOLÚMICAS EM SISMOGRAMAS DE BANDA-LARGA: APLICAÇÃO AO ESTUDO DO MANTO INFERIOR E DA CAMADA D''

Nuno A. Dias^(a), L.A. Mendes Victor^(b) (c) e R. Kind^(d)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^(c) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^(d) GeoForschungsZentrum, Potsdam, Alemanha.

Publicado em: *Proceedings do 2º Simpósio da Associação Portuguesa de Meteorologia e Geofísica, pp. 10-15, Évora, Portugal, Fevereiro 2001.*

A região compreendida entre os últimos 300 km do manto inferior (camada D'') e a fronteira Manto-Núcleo (denominada CMB, de Core-Mantle Boundary) desempenha um papel fulcral na Geodinâmica Interna da Terra, embora a sua influência ainda não seja completamente entendida, requerendo o seu estudo uma abordagem multidisciplinar. Do ponto de vista da sismologia, o estudo da propagação de ondas do tipo P permite caracterizar a topografia destas interfaces situadas no manto inferior, enquanto que o recurso à análise das ondas S permite estudar a sua anisotropia. Os estudos desenvolvidos nos últimos 15 anos revelam um carácter menos homogéneo para o manto inferior do que se supunha, indicando um elevado grau de heterogeneidade para a camada D''. O estudo descrito refere-se ao método de análise, recolha e selecção de dados relativos à reflexão de ondas P no topo das duas descontinuidades, pormenorizando os cuidados a ter de acordo com a zona seleccionada para o estudo, e a sua relação com o projecto COMBO-NET.

THE ROLE OF CARBON PRECURSOR ON BORON CARBIDE SYNTHESIS BY LASER-CVD

A.J. Silvestre^(a), M.J. Santos^(b) and O. Conde^(b)

^(a) Instituto Superior de Transportes; Present adress: Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.

Publicado em: *Actas da conferência Materiais 2001, 1^a International Materials Symposium, Coimbra, Portugal, 9 - 11 de Abril de 2001. Artigo posteriormente submetido e aceite para publicação na Materials Science Forum.*

Boron carbide is a highly refractory material that is of great interest for both its structural and electronic properties. In this work, we report on the synthesis of rhombohedral B₄C coatings on fused silica substrates by CO₂ laser-assisted chemical vapour deposition (LCVD), using a dynamic reactive atmosphere of BC₃, H₂ and CH₄ or C₂H₄. The influence of the carbon precursor on the deposition kinetics is discussed. The use of ethylene as carbon precursor presents several advantages compared to methane, which is the conventional carbon precursor in CVD processes. These advantages are mainly related with its higher absorption coefficient at the laser wavelength and a higher sticking coefficient, which enables to attain higher deposition rates at lower deposition temperatures and lower carbon precursor concentrations. Films with carbon content from 16 to 21 at. %, as measured by electron probe microanalysis (EPMA), were grown at deposition rates as high as 0.12 μm.s⁻¹. Microstructural analysis was carried out by Raman microspectroscopy and glancing incidence X-ray diffraction (GIXRD) was used to study the crystallographic structure and to determine the lattice parameters of the films.

Keywords: Rhombohedral B₄C coatings; Laser-CVD; Crystallographic structure.

LASER-ASSISTED DEPOSITION OF r-B₄C COATINGS USING ETHYLENE AS CARBON PRECURSOR

M.J. Santos^(a), A.J. Silvestre^(b) and O. Conde^(a)

^(a) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^(b) Instituto Superior de Transportes; Present adress: Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da E-MRS 2001 European Materials Research Society Spring Meeting, Strasbourg, França, 5 - 8 de Junho de 2001. Artigo posteriormente submetido e aceite para publicação na Surface and Coatings Technology.*

Boron carbide is a highly refractory material that is of great interest for both its structural and electronic properties. In this work, we report on the synthesis of rhombohedral B₄C coatings on fused silica substrates by CO₂ laser-assisted chemical vapour deposition (LCVD), using a dynamic reactive atmosphere of BCl₃, C₂H₄ and H₂. The use of ethylene as carbon precursor presents several advantages compared to methane, which is the conventional carbon precursor in CVD processes. These advantages are mainly related with its higher absorption coefficient at the laser wavelength and a higher sticking coefficient, which enables to attain higher deposition rates at lower deposition temperatures. Films with carbon content from 16 to 21 at. %, as measured by electron probe microanalysis (EPMA), were grown at deposition rates as high as 0.12 μm.s⁻¹. Microstructural analysis was carried out by Raman microspectroscopy and glancing incidence X-ray diffraction (GIXRD) was used to study the crystallographic structure and to determine the lattice parameters of the films. A kinetic study of the reactive system used to deposit the B₄C is presented.

Keywords: Rhombohedral boron carbide (r-B₄C), Laser-CVD, growth kinetics.

REGIME LEGAL SOBRE A POLUIÇÃO SONORA (DECRETO-LEI Nº292/2000)

Carlos César Correia Rodrigues^(a) ^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Spectris Portugal.

Publicado em: *11ª Conferência da Laborsegur – Trabalho em Segurança, Lda. – Porto, 6 de Julho de 2001.*

A entrada em vigor a 14 de Maio de 2001 do Decreto-Lei nº 292/2000, também denominado Regime Legal Sobre a Poluição Sonora, determinou a revogação do Decreto-Lei nº 251/87, conhecido por Regulamento Geral Sobre o Ruído.

Este novo diploma, que tem como principais objectivos não só a actualização técnica à luz das novas tendências europeias nesta matéria, como também a clarificação das competências atribuídas às diferentes entidades intervenientes na sua aplicação, coloca lógicas de abordagem das conflitualidades sociais geradas por problemas devidos ao ruído que urge debater e esclarecer.

AMS RESULTS AND IMPLICATIONS ON THE EMPLACEMENT MECHANISM OF THE RADIAL DIKE SWARM OF THE MAFRA COMPLEX, LUSITANIAN BASIN, PORTUGAL.

C.R. Nogueira^(a), M. Moreira^{(b) (c)}, J.F. Monteiro^{(a) (c)}, P. Terrinha^(a) e M.C. Kullberg^(a).

^(a) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(c) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa.

Publicado em *Actas da 7ª Conferência Anual do GGET, Grupo de Geologia Estrutural e Tectónica – Sociedade Geológica de Portugal*, pp. 33-36, Lisboa, Setembro 2001.

Recent studies of magmatic flow in dikes of the radial dike swarm of the Mafra Complex (Lusitanian Basin) using the anisotropy of magnetic susceptibility (AMS) methodology revealed good statistical consistency of the magnetic fabric of the dikes and correlation to the swarm centre. Experimental data showed good clustering of minimum susceptibility axes, K3, near the dike pole; tri-axial magnetic fabric, defining a magnetic foliation plane (MFP); and no post-emplacment deformation. Magmatic flow vectors were determined allowing an estimation of the possible depth of the magmatic chamber. Data suggest that the horizontal stress field was not isotropic at the time of emplacement.

SOME PROBLEMS ON THE USUAL INTERPRETATION OF AMS IN BASALTIC DIKES

Moreira, Mário^{(a) (b)}; Geoffroy, Laurent^(c); Mendes Victor, L.A.^(d); Pozzi, J.P^(e)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^(c) Université du Maine, Le Mans, França; ^(d) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^(e) École Normale Supérieure, Paris, França.

Publicado em: *Livro de resumos Magiber I – Paleomagnetismo em Espanha e Portugal*, pp. 30-31, Burgos, Espanha, Setembro 2001.

In narrow dikes the use of the AMS (anisotropy of magnetic susceptibility) is a classical tool for the determination of the petrofabric of the rock, which enables, in some conditions, to infer the direction of the magmatic flow. The orientation of the magnetic lineation axis is generally assumed as representative of the direction of magmatic flow in

the dike as, for exemple Knight & Walker (1988), Rochette et al. (1991), Ernst & Baragar, (1992), Dragonni et al. (1997).

In this work we present results from Azores dikes showing that the orientation of magnetic lineation axis is more erratic that the orientation of the magnetic foliation plane relatively to the local orientation of the margin plane.

EMPLACEMENT MECHANISM OF THE RADIAL DIKE SWARM OF THE MAFRA COMPLEX, BY AMS ANALYSIS.

C.R. Nogueira^(a), M. Moreira^{(b) (c)}, J.F. Monteiro^{(a) (c)}, P.Terrinha^(a), M.C.Kullberg^(a)

^(a) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(c) Centro de Geofísica da Universidade de Lisboa.

Publicado em: *Livro de resumos Magiber I – Paleomagnetismo em Espanha e Portugal, pp. 32-33, Burgos, Espanha, Setembro 2001.*

Magmatic shallow chambers and associated dike complexes can play an important role in the evaluation of the stress field. In some cases, when the crust is submitted to an almost isotropic stress field (i.e. when deviatoric stress is low) these igneous bodies can determine the stress field pattern in localized regions of the upper crust. The strike of dikes is theoretically perpendicular to the least principal stress and parallel to the plane defined by the maximum and intermediate principal stresses. The magma flow vector, its strike and sense, is dependent of the depth of the magmatic chamber, fracturing mechanism and fractures propagation sense.

In this work we study the best preserved part of the radial dike swarm of the Mafra complex, using the AMS methodology.

Our objective, besides the characterization of the magnetic properties of the basic dikes, is the determination of the magma flow vector, possible depth of the magmatic chamber and the emplacement mechanism of the dike swarm.

VIBRAÇÕES NO CORPO HUMANO

Carlos César Correia Rodrigues^(a) ^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Spectris Portugal.

Publicado em: *Conferência “A Evolução Tecnológica na Melhoria das Condições de Trabalho na Indústria Extractiva” – Instituto Geológico e Mineiro – Porto, 12 de Dezembro de 2001.*

O termo vibração descreve a oscilação mecânica de um determinado corpo relativamente a um ponto de referência. Desta forma, o Ser Humano encontra-se diariamente sujeito a vibrações de diferentes tipos, como sejam as experimentadas em casa devido, por exemplo, à passagem de tráfego rodoviário, ferroviário ou aéreo; as experimentadas no transporte entre a casa e o emprego, ou ainda as vibrações inerentes ao local e/ou posto de trabalho respectivo. Estão neste último caso as vibrações sofridas por trabalhadores que utilizam maquinaria manual do tipo martelos pneumáticos, rebarbadoras, etc. - Vibrações no Sistema Braço-Mão; ou as provocadas ao corpo do trabalhador como um todo, nomeadamente, no caso deste operar sentado em veículos ou máquinas - Vibrações no Sistema Corpo Inteiro. Devido ao facto de as vibrações transmitidas ao corpo humano poderem, de acordo com a sua severidade e o tempo de exposição, provocar lesões temporárias ou mesmo definitivas, foram estabelecidos critérios que recomendam os valores máximos de exposição, quer em termos do Sistema Braço-Mão, quer em termos do Sistema Corpo Inteiro. Estes critérios são descritos na Normalização Nacional e Internacional em vigor.

UM MÉTODO INOVADOR PARA CONSTRUÇÃO DE UMA FONTE DE ALTA TENSÃO PULSADA BASEADA EM SEMICONDUTORES PARA IMPLANTAÇÃO IÓNICA POR IMERSÃO EM PLASMA

Luis Redondo^(a); Elmano Margato^(a); José Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Surface and Coatings Technology*, volume 136/1-3 pp. 51-54, 2 Fevereiro 2001.

Apresenta-se neste artigo um método inovador para obtenção de impulsos de alta tensão (kV) para aplicações em implantação iónica por imersão em plasma (IIP). O circuito proposto baseia-se num transformador de impulsos, com uma malha de desmagnetização do tipo RCD, que tira vantagem do funcionamento com baixo factor de ciclo para reduzir a tensão aos terminais de todos os semicondutores utilizados. Foi construído um protótipo inicial com semicondutores de 800V para impulsos de saída com uma tensão -5kV , $5\mu\text{s}$ largura de impulso e 10kHz de frequência. Apresentam-se e discutem-se os resultados teóricos e experimentais.

HYBRID PROCESS SIMULATION: A POWERFULL RESOURCE FOR INDUSTRIAL AUTOMATION LABORATORY

João Palma^{(a)(b)}; José Antunes^(c); Filomena Simões^(d); Jorge Esteves^(e); Maria J. Martins^(e)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Laboratório Nacional de Engenharia Civil; ^(c) EDP; ^(d) REXEL; ^(e) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Proceedings of the 12th EAEEIE Conference*, pp. 151-155, Nancy, França, Maio 2001.

Experimental work with true physical systems is of major importance in electrical engineering education, especially in industry and technology related subjects. But that often requires judicious choice and planning of learning material and methodology.

This is particularly the case of Industrial Automation, for which professional up-to-date programmable logic controllers (PLC) and programming tools can be achieved at moderate cost. However, real

processes to be controlled, which are essential for PLC programming and testing, are often expensive, bulky, sometimes dangerous, and usually not manageable in a laboratory.

A hybrid simulator consists of an interface unit communicating with a PC and having a set of connectors that stand as the wiring board of a physical process. A simulation program running on the PC reads and activates specific input and output points in the interface unit and simultaneously shows the process graphically.

A great number of different simulated processes can be created on the PC by using a high level language. In this paper some examples are presented in order to show the capabilities of this kind of low cost versatile laboratory resource.

REGULAMENTAÇÃO DO EXERCÍCIO DA PROFISSÃO NA ÁREA DA ENGENHARIA ELECTROTÉCNICA

Constantino V. S. Soares^(a)

^(a) ISEL - Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em *Engenium* n.º 59, pp 18-20, Junho 2001

É notório, e sentido por todos os profissionais desta especialidade, o desajustamento dos principais documentos legislativos que regulam o exercício da actividade da Engenharia Electrotécnica; desde o anteprojecto de revisão do Decreto “73/73”, ao Decreto-Regulamentar “31/83” e culminando no “célebre” Decreto-Lei “59/2000”, é urgente que se faça uma reflexão geral sobre toda a problemática da Regulamentação e suas implicações no licenciamento das “instalações eléctricas” (incluindo as “instalações RITA”).

No presente artigo, é feita uma abordagem sobre a desactualização e descaracterização da regulamentação vigente face à especificação dos cursos na área da Engenharia Electrotécnica e que urge rectificar, sob o risco de banalização de uma actividade que está longe de alcançar a dignidade e o lugar a que tem direito.

Neste sentido é apresentada uma metodologia tendente a melhorar a prática actual de responsabilização e de aprovação dos projectos na área da Engenharia Electrotécnica, com uma distinção clara entre as funções de “Projectista” e de “Técnico Responsável”.

CARREGADOR DE BATERIAS UTILIZANDO TECNOLOGIA DE FONTES COMUTADAS

Fernando Almeida^(a); José Antunes^(a); Susana Raposo^(a); Elmano Margato^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Actas das 7.^{as} Jornadas Hispano Lusas de Ingeniería Eléctrica, vol. 1, pp. 141-148, Madrid, Espanha, Julho 2001.*

Apresenta-se neste artigo um carregador de baterias, que utiliza a tecnologia das fontes comutadas, apropriado para realizar a recarga de baterias de ácido – chumbo de 12V vulgarmente utilizadas em automóveis. A recarga da bateria é realizada a corrente constante, com dois níveis de patamar, cujo valor depende do estado actual de carga da bateria.

O carregador de baterias proposto recebe a energia da rede de corrente alternada, em monofásico, e após a necessária rectificação, utiliza uma fonte comutada do tipo *forward*, a 50kHz, com malha de desmagnetização do tipo RCD, para impor à bateria a apropriada corrente de carga.

O projecto do circuito de potência, com especial enfoque para o dimensionamento transformador de alta frequência, é abordado com detalhe nesta comunicação e é feita referência ao sistema de controlo utilizado.

A técnica de recarga de baterias proposta foi ensaiada em baterias de ácido – chumbo, mas pode ser aplicada noutro tipo de baterias.

BANCADA DE ENSAIO COM MÁQUINAS ELÉCTRICAS ROTATIVAS COMO CONTRIBUIÇÃO PARA O ESTUDO DE SUSPENSÕES ELECTROMAGNÉTICAS

Paulo Gambôa^(a); Isménio Martins^(b); Jorge Esteves^(c); Elmano Margato^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Escola Superior Tecnologia, Univ. Algarve; ^(c) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Actas das 7.^{as} Jornadas Hispano Lusas de Engenharia Eléctrica, pp. 171-176, Volume IV, ISBN 84-95821-04-4, 2001; Madrid, Espanha, Julho 2001.*

Dada a complexidade e custos inerentes à montagem e instalação em laboratório de uma bancada de testes de simulação para suspensões automóveis, pretendeu-se com o trabalho que este artigo documenta contribuir para o desenvolvimento nessa área, apresentando um sistema composto por dois accionamentos eléctricos rotativos, um incluindo uma máquina assíncrona e outro de uma máquina síncrona de magnetos permanentes, acopladas mecanicamente, trabalhando uma como elemento perturbador e a outra como elemento compensador, onde são testados os algoritmos de regulação e controlo em ensaio. O objectivo é verificar se para um binário perturbador, o accionamento eléctrico rotativo consegue manter uma determinada posição desejada. Desta forma o algoritmo proposto poderá ser testado e, prevendo posteriormente a utilização de um conversor de movimento rotativo em linear, será analisado se pode ser ou não uma alternativa aos sistemas clássicos.

CONTROLO DE VELOCIDADE E ENFRAQUECIMENTO DE CAMPO DE UMA MÁQUINA DE CORRENTE CONTÍNUA UTILIZANDO UM ÚNICO MÓDULO INTEGRADO DE POTÊNCIA

José Faria^(a); João Jorge^(a); Elmano Margato^(a); João Palma^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Laboratório Nacional de Engenharia Civil

Publicado em: *Actas das 7.^{as} Jornadas Hispano Lusas de Ingeniería Eléctrica, vol. 1, pp. 209-214, Madrid, Espanha, Julho 2001.*

Apresenta-se neste artigo a implementação do controlo de velocidade de uma máquina de corrente continua com enfraquecimento de campo utilizando um único módulo integrado de electrónica de potência.

Na alimentação da máquina, circuitos do induzido e do indutor, utiliza-se um módulo compacto comercializado para aplicação industrial como ondulator trifásico. Porém, com o comando adequado, é possível obter outras topologias de conversores estáticos, designadamente *choppers*. Com a presente solução realiza-se simultaneamente um *chopper* de 4 quadrantes para alimentação do induzido da máquina e um *chopper* de 1 quadrante para regular a excitação e alcançar valores de velocidade superiores à nominal.

A corrente é controlada e limitada por forma a serem impedidas sobreintensidades resultantes de sobrecargas ou curto-circuitos no circuito de potência do accionamento. O circuito de controlo de velocidade da máquina foi projectado para satisfazer exigências de funcionamento tanto em regime estacionário como dinâmico. Com base na modelização do sistema proposto foi realizada a simulação do seu comportamento cujos resultados são comparados com os obtidos experimentalmente.

INTRODUÇÃO DAS VELOCIDADES DAS MASSAS SUSPENSA E NÃO SUSPENSA PARA CONTROLO DE SUSPENSÕES ACTIVAS AUTOMÓVEIS

Paulo Gambôa^(a); Isménio Martins^(b); Jorge Esteves^(c); Elmano Margato^(a); Pina da Silva^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Escola Superior Tecnologia, Univ. Algarve; ^(c) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Actas das 7^{as} Jornadas Hispano Lusas de Engenharia Eléctrica, pp. 177-182, Volume IV, ISBN 84-95821-04-4, 2001, Madrid, Espanha, Julho 2001.*

O desenvolvimento de novos materiais ferromagnéticos, da electrónica de potência e das técnicas de controlo, permitiram a construção de actuadores lineares de pequenas dimensões e considerável força. A redução das perdas por atrito e a grande flexibilidade destes actuadores permite a sua aplicação em suspensões automóveis. Neste artigo propõe-se analisar a suspensão pseudo-levitante, com uma lei de controlo adaptativa para as várias frequências das irregularidades da estrada, obtida a partir da contribuição das velocidades da massa suspensa, não suspensa e da diferença entre as suas posições. Será igualmente descrito a estrutura e constituição da bancada de ensaios para simulação de suspensões.

GAIN SCHEDULING VALUES DEFINITION FOR DISTURBANCES CONTROL OF AN ELECTRICAL AUTOMOBILE ACTIVE SUSPENSION

Paulo Gambôa^(a); Isménio Martins^(b); Jorge Esteves^(c); Elmano Margato^(a); Pina da Silva^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Escola Superior Tecnologia, Univ. Algarve; ^(c) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Advances in Systems Science: Measurement, Circuits and Control, Electrical and Computer Engineering Series, Published by WSES Press, pp. 84-89, ISBN 960-8052-29-4, 2001, Crete, July 2001.*

The development of rare-earth magnetic materials, power electronics and control enabled the construction of lighter and smaller permanent magnet actuators. Its reduced friction losses and the natural control flexibility of the electric equipment should allow for improvements in the automobile suspension behaviour. In this paper it is proposed and analysed a pseudo-levitating suspension system working under an adaptive control law with all the contributions of velocity and positions of sprung and unsprung mass.

APARELHO DE MEDIÇÃO DIRECTA DE POTÊNCIAS (ACTIVA, REACTIVA E APARENTE), FACTOR DE POTÊNCIA E DISTORÇÃO HARMÓNICA TOTAL

Galiana Alves^(a); M^a. José Fontes^(a); Nuno Fontes^(a); F. Sales Rodrigues^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Actas das 7.^{as} Jornadas Hispano Lusãs de Ingeniería Eléctrica, vol. 1, pp. 141-148, Madrid, Espanha, Julho 2001.*

Apresenta-se neste artigo um aparelho de medição directa de potência activa, reactiva e aparente, factor de potência ($\cos \varphi$) e distorção harmónica total (T.H.D.-*Total Harmonic Distortion*).

A implementação electrónica dos circuitos utiliza uma topologia analógica fazendo uso de multiplicadores, montagens somadoras e divisoras e suas variantes, bem como montagens integradoras implementadas com base em amplificadores operacionais. Foram também utilizadas montagens de filtros analógicos, com base em AmpOp's, para cálculo de valores médios e para filtragem das componentes harmónicas da tensão, de modo a permitir a determinação da sua distorção.

Seguidamente apresentam-se os circuitos de implementação dos diferentes blocos. Está também presente a comparação dos resultados

experimentais com os obtidos num aparelho tomado como referência, quantificando-se assim a sua precisão.

PROJECTO ASSISTIDO POR COMPUTADOR DE SISTEMAS DE PROTECÇÃO CONTRA DESCARGAS ATMOSFÉRICAS DIRECTAS

Rafael Rodrigues^(a); Constantino Soares^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Actas das 7^{as} Jornadas de Engenharia Eléctrica, vol. IV, pp. 9-14, Madrid, Espanha, Julho de 2001.*

As descargas atmosféricas causam todos os anos elevados danos pessoais e materiais em todo o mundo. A normalização europeia, actualmente em vigor, considera o modelo electrogeométrico como sendo o melhor método para a concepção de sistemas de protecção contra as descargas atmosféricas directas. Neste artigo apresenta-se um software, baseado no modelo electrogeométrico, destinado a ser utilizado como ferramenta auxiliar do projectista de instalações eléctricas, nomeadamente, no que concerne à protecção de edifícios contra descargas atmosféricas directas. O SPDA (Sistemas de Protecção contra as Descargas Atmosféricas directas), permite a aplicação do modelo electrogeométrico em 3D (três dimensões), interagindo com o ambiente de trabalho do AutoCAD 2000[®], que possui os comandos necessários para o desenho de objectos em 3D. A utilização do SPDA permite a análise de risco, segundo a IEC 61662 e assinala, nos edifícios em estudo, os pontos de contacto com a esfera fictícia considerada.

STABILITY CRITERIA OF AN "ELASTIC" UNIVERSAL FUZZY POSITION CONTROLLER FOR MOTOR DRIVES

J. C. Quadrado^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Proceedings of MCSCC'01-IEEE, Rethimon, Julho 2001.*

A stability criterion for universal fuzzy position control drives is described.

This method allows an immediate definition of the stability boundaries through the knowledge of common motor parameters.

The method can be applied to almost every type of motors, from DC to Synchronous, regardless of most fuzzy controller characteristics.

“Elastic” fuzzy controller "gain" limits can be established allowing thereto an effortless steady state error response and usually limited boundaries in the input reference elimination. Fewer energy losses are also achieved without losing the stability of the control system. A numerical example is presented using a DC motor drive and an “elastic” universal fuzzy controller.

USING SIMPLIFIED OBSERVERS IN TORQUE OF AN INDUCTION MACHINE WITHOUT SPEED SENSOR

Joaquim Monteiro^(a); João Palma^{(a) (b)}; G. D. Marques^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Laboratório Nacional de Engenharia Civil; ^(c) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Proceedings of 11th IMEKO TC-4 Symposium – Trends in Electrical Measurement and Instrumentation and 6th Euro Workshop on ADC Modelling and Testing, vol. 2, pp. 140-144, Lisboa, Portugal, September 2001.*

A method is presented for on-line estimation of internal quantities to be used in the torque control of induction machines without speed sensor. In this paper simplified observers for rotor and stator flux linkages and for the electromechanically converted torque are discussed. These observers are obtained from induction machine dynamic equations and by using currents and voltages as input variables. Numerical results with such observers for rotor and stator flux linkages are shown, for evaluation of capacities and limitations. The quality of such observers, integrated in torque and flux control schemes, is verified by experimental results obtained by digital signal processing with a fast controller on the induction motor drive system.

ELECTRIC VEHICLES IN PORTUGAL: AN ODISSEY FROM OBLIVION TO OBVIOUS

Jorge Esteves^(a); António B. de Sousa^(b); Robert Stüssi^(c); Carlos Barroso^(d); José Maia^(e); Ricardo Félix^(f); Lívio Honório^(g); José Quadrado^(h); Raul Dionísio⁽ⁱ⁾

^(a) Instituto Superior Técnico; ^(b) Urbénia, Veículos e Tecnologias para o Sec. XXI, Lda.; ^(c) Agência Municipal de Energia de Lisboa; ^(d) Siemens S.A.; ^(e) Escola Superior de Tecnologia do I. P. de Setúbal; ^(f) Logistema, Lda.; ^(g) Electricidade de Portugal, S.A.; ^(h) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ⁽ⁱ⁾ Automóvel Club de Portugal

Publicado em: *Proceedings of the 18th International Electrical Vehicles Symposium, 20 Outubro 2001.*

This paper reports on the experience related to constitution and the first two years of APVE's life. In a country where the electric vehicle concept was almost forgotten till the annulment of the "Automotive Tax" for electric vehicles in the Portuguese national budget for 2001 (a feat in no small measure to be also attributable to APVE's public outreach actions) a non-governmental association made way to the introduction and demonstration of the electric vehicle concept in the country.

A report on the different activities will be presented remarking, *inter alia*, the importance of outreach actions, namely the organisation of a debate and vehicle demonstration during the informal meeting of EU Environment Ministers (Oporto, April 2000) and the active participation in the "European Car Free Day", at 22 September 2000 where, for a first time, seven Portuguese cities were involved. The first shake of public opinion was done on this day. Other activities, namely standardisation, conferences, events, etc. will also be outlined. An important corollary must be mentioned: that local private companies are now designing and producing EV in Portugal.

MULTI-SCENARIO LINGUISTIC CONTROL FOR INTELLIGENT ELECTROMECHANICAL POSITIONING ACTUATORS

J. C. Quadrado^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Proceedings of International Conference on Intelligent Robots and Systems, 2001, IEEE/RSJ, pp464-469, Novembro 2001.*

A controller for an electromechanical positioning actuator is synthesised. The different levels of intelligent behaviour of the resulting controller are analysed at, the skill level, the rule level and the knowledge level.

An analysis of the resulting system intelligent behaviour is presented, including its learning ability.

A comparison between the expected behaviour (simulation) and the obtained (experimental) is also presented.

CONTROL METHODS FOR POWER CONVERTERS

J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior Técnico; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Power Electronics Handbook, capítulo 19, pp 431-486, Editor M. H. Rashid, Academic Press, USA, 2001.*

This book chapter provides basic and some advanced skills to control electronic power converters, taking into account that the control of power converters is a vast and interdisciplinary subject. Control designers for power converters will study the static and dynamic behavior of the electronic power converter and how to design its elements for the intended operating modes. Designers must be experts on control techniques, especially the nonlinear ones, since power converters are nonlinear, time-variant, discrete systems, and designers must be capable of analog or digital implementation of the derived modulators, regulators, or compensators. Powerful modeling methodologies, basic and sophisticated control processes are used to obtain stable controlled power converters, not only with satisfactory static and dynamic performance, but also with low sensitivity against load or line disturbances.

STABILITY CRITERIA OF AN “ELASTIC” UNIVERSAL FUZZY POSITION CONTROLLER FOR MOTOR DRIVES

J. C. Quadrado^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico

Publicado em: *Mastorakis, N., L, Pecorelli-Peres, ed. - Advances in Systems Science: Measurements, Circuits and Control, pp 181-188, Electrical and Computer Engineering Series, Word Scientific and Engineering Society (WSES) Press, ISBN 960-8052-39-4, 2001.*

A stability criterion for universal fuzzy position control drives is described.

This method allows an immediate definition of the stability boundaries through the knowledge of common motor parameters.

The method can be applied to almost every type of motors, from DC to Synchronous, regardless of most fuzzy controller characteristics.

“Elastic ” fuzzy controller "gain" limits can be established allowing thereto an effortless steady state error response and usually limited boundaries in the input reference elimination. Fewer energy losses are also achieved without losing the stability of the control system.

A numerical example is presented using a DC motor drive and an “elastic ” universal fuzzy controller.

COGNITIVE INTELLIGENT CONTROLLER APPLIED TO ANGULAR ROTOR POSITIONING

J. C. Quadrado^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico

Publicado em *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics. SMCB-E-03022001-0008 (aceite para publicação).*

A cognitive intelligent controller for an electromechanical positioning actuator is synthesised.

The procedure uses a linguistic approach named Tendentious Vague Set theory (TSets) and the knowledge of the electromechanical position actuators’ characteristics.

Being TSets a generalisation of fuzzy sets, they are used to incorporate learning abilities into the system required to control an electromechanical positioning actuator.

After a short description of the TSets fundamentals and the definition of the desired characteristics for an intelligent control system, a cognitive

approach is used to synthesise a controller accordingly with the TSet controller structure.

The different levels of intelligent behaviour of the resulting controller are analysed at, the skill level, the rule level and the knowledge level.

An analysis of the resulting system intelligent behaviour is presented, including its learning ability. A comparison between the expected behaviour (simulation) and the obtained (experimental) is also presented.

SINGLE-STAGE THREE-PHASE BUCK-BOOST TYPE AC-DC CONVERTER WITH HIGH POWER FACTOR

V. F. Pires^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Escola Superior de Tecnologia de Setúbal; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *IEEE Trans. on Power Electronics (2001-485-LP)*.

A new control process for single-stage three-phase Buck-Boost type ac-dc converters with high power factor, sinusoidal input currents and adjustable output voltage is proposed. This converter allows variable power factor operation, but this work focus in achieving unity power factor. The proposed control method includes a fast and robust input current controller based on a vectorial sliding mode approach. This active non-linear control strategy, applied to this converter allows high quality input currents. Given the comparatively slow dynamics of the *dc* output voltage, a proportional integral (PI) controller is adopted to regulate the converter output voltage. The voltage controller modulates the amplitudes of the current references, which are sinusoidal and synchronous with the input source voltages. Experimental results from a laboratory prototype show the high power factor and the low harmonic distortion characteristics of the circuit.

SLIDING MODE CONTROL OF MATRIX CONVERTERS WITH LEAD-LAG POWER FACTOR

S. Pinto^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Instituto Superior Técnico; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *EPE 2001*.

The modelling of a three-phase ac-ac matrix converter with an input 'LC' filter is presented and sliding mode controllers are designed in order to guarantee sinusoidal input and output waveforms at lead or lag input power factor. First, the matrix converter model, considering the high frequency input filter is obtained in α - β co-ordinates, using the Concordia transformation. The sliding mode controllers are designed based on this model, together with the state-space vectors modulation technique, which allows a more efficient choice of the switching strategy. The sliding mode guarantees a robust on-line control of the matrix converter output voltages and input currents, with lead or lag input power factor. In order to confirm the expected performance, simulation results are obtained and discussed.

SINGLE-PHASE UNITY POWER-FACTOR DOUBLE BUCK RECTIFIER: TOPOLOGY, OPERATION AND CONTROL

V. F. Pires^(a); J. Fernando Silva^{(a)(b)}

^(a) Escola Superior de Tecnologia de Setúbal; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Proceedings of IEEE/IECON 2001*.

This paper presents a new single-phase high power factor double buck rectifier. Unlike the buck rectifier, in which the output voltage is always smaller than the maximum input voltage, the proposed converter can operate with higher output voltages. The converter topology and operation are presented. A sliding mode control of the input current, capable of fast and robust current control, is also proposed. Using this control method, the converter presents high power factor and draws almost sinusoidal input currents. A proportional integral (PI) controller is used to regulate the output voltage of the converter. This external voltage controller modulates the amplitude of the input current reference. Experimental results from a laboratory prototype are presented and discussed.

CONTROLO DA MÁQUINA DE INDUÇÃO ACTUANDO NO FLUXO ESTATÓRICO COM ESTIMAÇÃO DOS VECTORES DE FLUXO

Joaquim José Rodrigues Monteiro^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Mestrado em: *Engenharia Electrotécnica e de Computadores*

Grau Concedido por: *Universidade Técnica de Lisboa / IST*

Orientadores: *Prof. Doutor Gil Domingos Marques, Prof. Associado do IST e Prof. Doutor João Carlos Pires da Palma, Eq. A Prof.*

Coordenador do ISEL

Provas Concluídas em: *17 de Maio de 2001*

Neste trabalho é feita uma breve introdução aos accionamentos de velocidade variável, distinguindo alguns métodos de controlo vectorial da máquina assíncrona, designadamente do controlo por orientação de campo e do controlo directo de fluxo e binário.

É efectuado o estudo de uma técnica de controlo da máquina de indução designada por controlo de binário pelo vector de fluxo estatórico sem medição da velocidade e com estimação de fluxos. Deste estudo salienta-se: a modelização, a simulação com obtenção de resultados numéricos e a implementação laboratorial com registo de resultados experimentais. A comparação dos dois tipos de resultados, mostra a existência de um erro estático no binário que cresce com a velocidade.

Faz-se uma análise cuidada da lei de controlo, e o resultado desta investigação traduz-se em algumas soluções de estratégias para minimizar o erro estático presente no binário. A primeira baseia-se na compensação do atraso do vector de fluxo estatórico. Na segunda é realizado um controlo de fluxos em coordenadas dq, onde são utilizados reguladores proporcionais integrais (PI). Por fim o terceiro baseia-se no controlo de fluxos em coordenadas dq, com reguladores PI e um sistema de desacoplamento. Para todas estas soluções obtiveram-se resultados numéricos, que mostram a correcção do erro estático no binário. Foi feita a realização experimental da primeira destas soluções, cujos resultados validam o método proposto.

FLEXIBILITY AND PRIVACY IN VIRTUAL ENTERPRISE INFRASTRUCTURES

L. M. Camarinha-Matos^(a); H. Afsarmanesh^(b); A. Luís Osório^{(c)(d)}

^(a)Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa; ^(b)University of Amsterdam, Faculty of Computer Science; ^(c)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(d)ESTEC, Estudos e Tecnologias da Informação.

Publicado em: *International Journal of Computer Integrated Manufacturing*, ISSN 0951-192X print, ISSN 1362-3052 online, vol. 14, n.º 1, pp. 66-82, Taylor & Francis Ltd., January 2001.

The concept of Virtual Enterprise is promoted by the current market and economic conditions worldwide, and facilitated by the recent developments in both information and communication technologies. A large number of international research and development projects are also contributing to the development of basic models and supporting infrastructures. However there is still the need to develop general infrastructures that support flexible and safe cooperation among enterprises. The Esprit PRODNET II project designed and implemented an open infrastructure to support industrial virtual enterprises with special focus on the needs of small and medium sized enterprises. The proposed architecture is described summarizing its main components. The federated approach for information sharing and management is described and the implemented mechanisms to support secure communications over the Internet are presented. Finally the creation and configuration steps for a virtual enterprise are discussed.

RELIABLE AND SECURE COMMUNICATIONS INFRASTRUCTURE FOR VIRTUAL ENTERPRISES

A. Luís Osório^{(a)(b)}; M. Martins Barata^{(a)(b)}

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)ESTEC, Estudos e Tecnologias da Informação.

Publicado em: *Journal of Intelligent Manufacturing, Special Issue on Virtual Enterprises*, vol. 12, n.º 2, pp. 175-187, April 2001.

The virtual enterprise paradigm is the key for SMEs to enter into the business to business electronic commerce. Nevertheless SMEs require a reliable infrastructure connecting transparently to the global network of enterprises their IT application tools implementing the internal business

processes. Such infrastructure is deeply grounded on a communication infrastructure that might offer operative and management mechanisms able to cope with the complexity of the underlying heterogeneous computational and communication available resources. Beyond information communication security (privacy, integrity and authentication), an operating reliable infrastructure to manage information communication is required. The SME business cannot support the great vulnerability to failures presented by a distributed system made of heterogeneous technologies. The PRODNET Communication Infrastructure aims to offer beyond a secure and high availability communication infrastructure, a set of features to cope with such distribution and heterogeneity implemented by a flexible communication management module. Considering that SMEs don't have their own IT support, the PRODNET Communication Infrastructure also offers remote management/maintenance capabilities.

FROM PASSIVE MICROSTRIP SINGLE PATCH ANTENNAS TO ACTIVE MICROSTRIP PATCH ARRAYS

Henrique José da Silva^{(a)(b)}; Maria João Rosário^{(b)(c)}; Custódio Peixeiro^{(b)(c)}

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto de Telecomunicações; ^(c)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Actas da 3.^a Conferência de Telecomunicações, pp. 52-56, Figueira da Foz, Portugal, Abril 2001.*

This paper presents a large range of practical results concerning microstrip patch antennas, for reception on X band. From passive and active single patches to active arrays, all the designed structures are explained and the results commented and compared.

Following a step by step methodology, each study evolves from previous work. The design of an X band Low Noise Amplifier (LNA) with a 2 GHz bandwidth, was the first contribution. The study of wire bond interconnections, ended by a new model for higher thickness and lower permittivity substrates, comes on second place. Once available the active device, to be integrated on the passive patches, and known the interconnection between both the LNA and the antenna, passive and active single patches were designed and studied. Finally, this work went forward on the design and measurements of passive and active arrays. All the designs and experiments points to a main goal: reach low cost active antennas, with ideal trade-offs for patch and amplifier substrates.

The work presented on this paper is related to previous studies. For the overall set of passive and active microstrip patch antennas, gain and bandwidth improvements are showed, as well as, gain control on single and array variants. Back radiation, cross-polarisation rejection and radiation from antenna feed lines, are also discussed.

EFFECT OF a-SiC:H FILM COMPOSITION ON THE PERFORMANCE OF LARGE AREA OPTICAL SENSORS

P. Louro^(a); Y. Vygranenko^(a); M. Fernandes^(a); M. Vieira^(a); M. Schubert^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Institut für Physicalische Elektronik, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Advanced Materials and Devices for Large-Area Electronics, Materials Research Society Symposium Proceedings, S. Francisco, USA, vol. 685E, April 2001.*

A series of large area single layers and heterojunction cells in the assembly glass/ZnO:Al/p (SixC1-x:H)/i (Si:H)/n (SixC1-x:H)/Al ($0 < x < 1$) were produced by PE-CVD at low temperature. Junction properties, carrier transport and photogeneration are investigated from dark and illuminated current-voltage and capacitance-voltage characteristics. For the heterojunction cells Atypical J-V characteristics under different illumination conditions are observed leading to poor fill factors. High serial resistances around $10^6 \Omega$ are also measured. These experimental results were used as a basis for the numerical simulation of the energy band diagram, and the electrical field distribution of the whole

structures. Further comparison with the sensor performance gave satisfactory agreement.

Results show that the conduction band offset is the most limiting parameter for the optimal collection of the photogenerated carriers. As the optical gap increases and the conductivity of the doped layers decreases, the transport mechanism changes from a drift to a diffusion-limited process.

CHARGE CARRIER TRANSPORT IN a-Si:H/a-SiC:H HETEROJUNCTION WITH BLOCKING LAYER

Y. Vygranenko; M. Fernandes, P. Louro; A. Maçarico; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Advanced Materials and Devices for Large-Area Electronics, Materials Research Society Symposium Proceedings, S. Francisco, USA, vol. 685E, April 2001.*

This paper presents a one-dimensional numerical simulation of the charge carrier transport and photogeneration within a p-i-n (a-Si:H) homojunction and a p (a-SiC:H)/i (a-Si:H)/n (a-SiC:H) heterojunction with weakly-doped n-layers. A good matching between the simulated J-V characteristics and the corresponding experimental curves has been achieved for both configurations. By analysing the simulated band diagrams, electric field distributions, the electron and hole current densities, and the free carrier population profiles we conclude that in short-circuit mode the carrier transport is different in the homojunction and heterojunction due to band offsets.

Our results show that in the heterostructure, as the light intensity increases, the potential drop across the a-SiC:H n-layer increases leading to a significant change in the drift-diffusion balance across the i-layer. In the homojunction, at the same incident fluxes, the transport process remains drift dominated.

IMAGE ACQUISITION USING NON-PIXELED AMORPHOUS SILICON BASED SENSORS

M. Fernandes; Y. Vygranenko; J. Martins; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Advanced Materials and Devices for Large-Area Electronics, Materials Research Society Symposium Proceedings, S. Francisco, USA, vol. 685E, April 2001.*

We suggest to enhance the performance of image acquisition systems based on large area amorphous silicon based sensors by optimizing the readout parameters such as the intensity and cross-section of scanner beam, acquisition time and bias conditions. The main output device characteristics as image responsivity, signal to noise ratio and spatial resolution were analyzed in open circuit, short circuit and photodiode modes. The result show that the highest signal to noise ratio and best dark to bright ratio can be achieved in short circuit mode.

It was shown that the sensor resolution is related to the basic device parameters and, in practice, limited by the acquisition time and scanning beam properties. The scanning beam spot size limits the resolution due to the overlapping of dark and illuminated zones leading to a blurring effect on the final image and a consequent degradation in the resolution.

CONTROLLING THE LATERAL PHOTOCURRENT IN α -Si:H HETEROJUNCTION STRUCTURES: THE INFLUENCE OF THE BAND OFFSET ANALYSED THROUGH A NUMERICAL SIMULATION

A. Fantoni; M. Fernandes; P. Louro; R. Schwarz; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Amorphous and Heterogeneous Silicon-Based Films-2001, Materials Research Society Symposium Proceedings, S. Francisco, USA, vol. 664, April 2001.*

When an α -Si:H p-i-n structure is locally illuminated by a light spot, the non uniformity of light causes the appearance of a gradient in the carrier concentration between the illuminated and the dark zone. Carrier start to flow in agreement with such gradients, and when equilibrium is reached, the lateral diffusion process is counterbalanced by the appearance of a lateral component of the electric field vector in addition to the transverse usual one. The lateral fields act as a gate for the lateral flow of the carriers and small lateral currents appears at the transition region between

the illuminated and the dark zone. Such lateral photoeffect depends on the incident light wavelength, light intensity and on the device operation condition (mainly the applied bias). The introduction of carbon in the doped layers modifies the intensity and the extension of these lateral effects through the potential barriers deriving from the band banding at the interfaces. We have used the 2D numerical simulator ASCA to analyze the behavior of an a-Si:H p-i-n structure under local illumination with the goal of observing the appearance of the lateral components of the electric field and current density vectors. Different homo and heterojunctions have been simulated, outlining how the band offset at the interfaces influences the induced lateral photoeffect and aiming to explain how a correct device design and engineering can, depending on the foreseen application, alternatively enhance or reduce the intensity of such lateral effects.

CARRIER TRANSPORT AND PHOTOGENERATION IN LARGE AREA p-i-n Si/SiC HETEROJUNCTIONS

P. Louro^(a); Yu. Vygranenko^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Fernandes^(a); M. Vieira^(a); J. Gloeckner^(c); M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physikalische Elektronik, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Amorphous and Heterogeneous Silicon-Based Films-2001, Materials Research Society Symposium Proceedings, S. Francisco, USA, vol. 664, April 2001.*

Glass/ZnO:Al/p (SixC1-x:H)/i (Si:H)/n (SixC1-x:H)/Al (0<x<1) heterojunction cells were produced by PE-CVD at low temperature. Junction properties, carrier transport and photogeneration are investigated from illuminated current- and capacitance- voltage characteristics and spectral response measurements, in dark and under different illumination conditions. For the heterojunction cells high series resistance around $10^6 \Omega$ and atypical JV characteristics are observed leading to poor fill factors, also it was observed that the responsivity decreases with the increase of the light bias intensity. For the homojunction the behaviour is typical of a non optimised p-i-n cell and the responsivity varies only slightly with the light bias conditions. A numerical simulation gives insight into the transport mechanism

suggesting that in the heterojunctions and in dark conditions the transport mechanism depends almost exclusively on field-aided drift while under illumination it is dependent mainly on the diffusion of free carriers.

TAILORED LASER SCANNED PHOTODIODES (LSP) FOR IMAGE RECOGNITION

M. Vieira^(a); M. Fernandes^(a); P. Louro^(a); Y. Vygranenko^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physicalische Elektronik, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Amorphous and Heterogeneous Silicon-Based Films-2001, Materials Research Society Symposium Proceedings, S. Francisco, USA, vol. 664, April 2001.*

A tailored ZnO:Al/a-p-i-n SiC:H/Al configuration for the laser scanned photodiode (LSP) imaging detector is proposed. The LSP utilizes light modulated depletion layers as detector and a laser beam for readout. When highly resistive α -SiC:H doped layers are used its higher optical gap when compared with the active layer are responsible by charge accumulation at the illuminated interfaces which blocks the carrier collection under illumination. Those insulator-like layers act as MIS structures that prevent excess signal charge from blooming to the nearby dark regions avoiding the image smearing. The optical-to-electrical transfer characteristics show reciprocity between light intensity and image signal intensity only limited by the doped layers composition. Data reveal that the sensitivity, the responsivity and the spatial resolution are limited by the cell configuration while the linearity depends on the light source flux used to map the image onto the sensor. By using tailored SiC:H/Si:H/SiC:H p-i-n heterostructures an increase in the image signal optimized to the blue is achieved with a responsivity of 0.2 mW/cm^2 and a spatial resolution of $20 \mu\text{m}$.

OPTIMIZED LASER SCANNED PHOTODIODES (LSP) IMAGING TRANSDUCER

M. Vieira^(a); M. Fernandes^(a); P. Louro^(a); R. Schwarz^(a); M. Schubert^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Institut für Physikalische Elektronik, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Physica Status Solidi (a)*, vol. 185, n.º 1, pp. 129-135, May 2001.

An optimized ZnO:Al/a-pin SixC1-x:H/Al configuration for the laser scanned photodiode (LSP) imaging detector is proposed. The LSP utilizes self-field-induced depletion layers as detector and a laser beam for readout.

The effect of the sensing element structure, cell configuration and light source flux are investigated and correlated with the sensor output characteristics. Experimental data reveal that the large optical gap and the low conductivity of the doped a-SixC1-x:H layers are responsible by an induced inversion layer at the illuminated interfaces which blocks the carrier collection. These insulator-like layers act as MIS gates that prevent excess signal charge from spreading to the nearby dark regions, which would lead to image smearing. The physical background of the LSP is discussed.

MOBILE COMMUNICATIONS BASED ON AN EMITTER/RECEIVER DYNAMICS MODEL

Fernando M. G. Sousa^(a); José M. N. Leitão^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the IEEE VTS 53rd Vehicular Technology Conference, VTC 2001 Spring*, vol. 4, pp. 2998-3002, Rhodes, Greece, May 2001.

Mobile radio communication systems are generally designed without taking into account the relative emitter/receiver phase dynamics. This paper formulates navigation and communication as aspects of an absolute phase estimation problem. Phase variations due to relative emitter/receiver motion are modeled as a third order Gauss-Markov process. Symbol-by-symbol detection and phase tracking are performed by a receiver open-loop structure consisting of a bank of stochastic ‘matched’ nonlinear filters and a maximum a posteriori (MAP) decision algorithm. Simulation results, including Low Earth Orbit (LEO) satellite

communication, are presented showing the possibilities of the proposed approach.

A SECOND HARMONIC CLASS-F POWER AMPLIFIER IN STANDARD CMOS TECHNOLOGY

Fernando Fortes^{(a)(b)}; Maria João do Rosário^{(b)(c)}

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto de Telecomunicações; ^(c)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 49, n.º 6, pp. 1216-1220, June 2001.

For personal communications systems, the highest possible integration on monolithic technology of all RF functions is desirable. The most difficult component to be monolithically integrated with all other functions is the output power amplifier. This paper describes the design and test of an integrated class-F power amplifier with 200 mW output power at 1.9 GHz and a 3 V power supply based on a 0.6 μm CMOS standard technology. A theoretical study of class-F operation that highlights the influence of nonideal active devices and output network topology on the circuit behavior was performed to have guidelines for amplifier optimization.

INTERNAL ION MOLECULE REACTIONS INSIDE HETEROGENEOUS CLUSTERS

L. F. Casinhas; J. M. A. Frazão^(a); J. M. C. Lourenço^(c); P. Limão Vieira^(c); M. Áurea Cunha^(b); M. L. Bhatt; J. Los^(d); A. M. C. Moutinho^(c)

Centro de Física Molecular da Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, Complexo I; ^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)CeFITec, Departamento de Física, Faculdade de Ciências e Tecnologia; ^(d)FOM, Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam, The Netherlands.

Publicado em: *XIX International Symposium on Molecular Beams, Book of Abstracts, Università di Roma "La Sapienza", Roma, Italy, June 2001.*

Internal cluster ion molecular reactions (ICIMR) are often triggered when weakly bound molecular cluster are ionised either by electrons of

photons. In previous studies, with ions obtained from electronic impact in homogeneous OCS and CS₂ clusters, we have reported that the different mechanisms involved in these reactions are strongly dependent of the geometries of the neutral cluster as well as the bondstrengths in the neutral and ion species inside the cluster in which they occur. In this work, we present preliminary measurements of such reactions in heterogeneous clusters obtained by mixed expansions of CO₂ and OCS gases seeded in argon.

LASER SCANNED PHOTODIODES (LSP) FOR IMAGE SENSING

M. Vieira^(a); M. Fernandes^(a); P. Louro^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physikalische Electronic, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Euroensors XV, Munich, June 2001 (to be published in Sensors and Actuators A).*

An optimized ZnO:Al/a-pin SixC1-x:H/Al configuration for the laser scanned photodiode (LSP) imaging detector is proposed and the read-out parameters improved. The effect of the sensing element structure, cell configuration and light source flux are investigated and correlated with the sensor output characteristics. Data reveals that for sensors with wide band gap doped layers an increase on the image signal optimized to the blue is achieved with a dynamic range of two orders of magnitude, a responsivity of 6 mA/W and a sensitivity of 17 μWcm^{-2} at 530 nm. The main output characteristics such as image responsivity, resolution, linearity and dynamic range were analyzed under reverse, forward and short circuit modes. The results show that the sensor performance can be optimized in short circuit mode. A trade-off between the scan time and the required resolution is needed since the spot size limits the resolution due to the cross-talk between dark and illuminated regions leading to blurring effects.

BIAS DEPENDENT PHOTOCURRENT COLLECTION IN p-i-n a-Si:H/SiC:H HETEROJUNCTION

P. Louro^(a); M. Vieira^(a); Y. Vygranenko^(a); M. Fernandes^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physikalische Electronic, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Euroensors XV, Munich, June 2001 (to be published in Sensors and Actuators A).*

A series of large area single layers and heterojunction cells in the assembly glass/ZnO:Al/p (Si_kC_{1-x}:H)/i (Si:H)/n (Si_kC_{1-x}:H)/Al (0<x<1) were produced by PE-CVD at low temperature. Junction properties, carrier transport and photogeneration are investigated from dark and illuminated current-voltage and capacitance-voltage characteristics. For the heterojunction cells S-shaped J-V characteristics under different illumination conditions are observed leading to poor fill factors. High serial resistances around 10⁵ Ω are also measured. Simulated results confirm the experimental findings suggesting that the transport in dark depends almost exclusively on field-aided drift while under illumination it is dependent mainly on minority carriers the diffusion.

READOUT IMPROVEMENT IN LARGE AREA a-SiC:H BASED IMAGE SENSORS

M. Fernandes; Y. Vygranenko; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Amorphous and Crystalline Silicon Carbide: Material & Applications, European Materials Research Society Symposium Proceedings, Strasburg, France, June 2001 (to be published in Applied Surface Science).*

Large area hydrogenated amorphous silicon p-i-n structures with low conductivity doped layers were proposed as single element image sensors. The image acquisition technique consists in using a modulated light beam to scan the entire active area and recording the photoresponse in each scanning position.

We suggest to enhance the system performance by optimizing the readout parameters such as the intensity, cross-section and wavelength of scanner beam, acquisition time, and sensor bias conditions. The main

output device characteristics as image responsivity, signal to noise ratio and spatial resolution were analyzed in open circuit, short circuit and photodiode modes. The results show that the highest signal to noise ratio can be achieved in short circuit mode. The relation between optimal scan beam intensity and photodiode parameters (current sensitivity, saturation current density, ideality factor and serial resistance) was obtained by analyzing the device electrical model and confirmed by experiment. Measurements were carried out using as scanner a focused laser source ($\lambda = 633 \text{ nm}$) with a spot size smaller than $50 \mu\text{m}$. Different scanner wavelengths were used to determine their influence on the sensor response.

Results show that the sensor resolution is related to the basic device parameters and, in practice, limited by the acquisition time and scanning beam properties. The dynamic behavior of the sensor was also analyzed.

MODELLING a-Si:H BASED p-i-n STRUCTURES FOR OPTICAL SENSOR APPLICATIONS

Y. Vygranenko; M. Fernandes; P. Louro; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Thin Film Materials for Photovoltaics, European Materials Research Society Symposium Proceedings, Strasburg, France, June 2001 (to be published in Thin Solid Films).*

This work presents an one-dimensional numerical simulation of the charge carrier transport and photogeneration within a p-i-n (a-Si:H) homojunction and a p (a-SiC:H)/i (a-Si:H)/n (a-SiC:H) heterojunction with weakly-doped n-layers. These structures are used as the sensing element in Laser Scanned Photodiode image sensors. The simulated J-V characteristics and calculated small signal responsivity as a function of background illumination intensity are in a good agreement with experimental curves. The analysis of the simulated band diagrams, electric field distributions, the electron and hole current densities, and the free carrier population profiles shows that the doping level and conduction band offset play a key role in controlling the collection efficiency of the heterostructure.

MEMORY EFFECTS IN HIGHLY RESISTIVE P-I-N HETEROJUNCTIONS FOR OPTICAL APPLICATIONS

R. Schwarz^{(a)(b)}; P. Louro^(a); Yu. Vygranenko^(a); M. Fernandes^(a); M. Vieira^(a); M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physicalische Elektronik, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Thin Film Materials for Photovoltaics, European Materials Research Society Symposium Proceedings, Strasburg, France, June 2001 (to be published in Thin Solid Films).*

Large area p-i-n diode structures based on amorphous hydrogenated silicon can be used as single element image sensors where the information is read out by a scanning laser beam. A high sensitivity is reached with silicon-carbon alloy contact layers. The higher defect density in the large band gap material is usually a problem for efficient carrier collection in solar cell applications. When used as an image sensor, however, the charge stored in deep defects represents an easy way to realize short-term image storage. In the case of a p-(Si:H)/i-(Si:H)/n-(SixC1-x:H) sensor structure we have measured a memory effect of about 1% after several minutes of image projection. Metastable sensor degradation is observed in accordance with the Staebler-Wronski effect. Fast degradation of sensor performance – corresponding to 90% erasable image storage capability – was studied in an unalloyed structure using a Nd:YAG laser system. The response can be modelled by a stretched exponential decay with parameters depending on the laser pulse energy.

LSP IMAGE SENSORS BASED ON SiC HETEROSTRUCTURES

M. Vieira^(a); M. Fernandes^(a); Y. Vygranenko^(a); A. Fantoni^(a); P. Louro^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physicalische Elektronik, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Amorphous and Crystalline Silicon Carbide: Material & Applications, European Materials Research Society Symposium Proceedings, Strasburg, France, June 2001, Applied Surface Science, 7383, pp. 1-6, 2001.*

A newly engineered ZnO:Al/a-pin SixC1-x:H/Al configuration for the laser scanned photodiode (LSP) imaging detector is proposed and the read-out parameters improved. The effect of the sensing element structure and light source flux are investigated and correlated with the sensor output characteristics. When wide band gap doped layers are used data reveals an increased image signal optimised to the blue, a dynamic range of two orders of magnitude, a sensitivity of 6 mA/W and a responsivity of 170 mWcm⁻² at 530 nm. The main output characteristics such as: image responsivity, resolution, linearity and dynamic range were analysed under reverse, and forward bias and short circuit mode. Results shows that in a wide range of incident light power the sensor performance are optimised in short circuit mode. A trade-off between read-out parameters and the required sensor characteristics is needed to minimise the cross talk between dark and illuminated regions.

TRANSPORT MECHANISM IN HIGH RESISTIVE SILICON CARBIDE HETEROSTRUCTURES

P. Louro; R. Schwarz; Yu. Vygranenko; M. Fernandes; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Amorphous and Crystalline Silicon Carbide: Material & Applications, European Materials Research Society Symposium Proceedings, Strasburg, France, June 2001 (to be published in Applied Surface Science).*

Large area single layers and heterojunctions in the assembly glass/ZnO:Al/p(SixC1-x:H)/i(Si:H) /n(SixC1-x:H)/Al (0<x<1) were produced by PE-CVD at low temperature (110°C). The deposition conditions of all the layers were kept constant while they varied in doped layers by adding methane during the deposition process. Depending on the methane flux the deposited n- and p-layers present conductivities in the range of $1.9 \times 10^{-12} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ to $1.8 \times 10^{-5} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ and optical gap, between 2.2 eV and 1.8 eV. The i-layer has a dark conductivity of $7 \times 10^{-11} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ and a photosensitivity higher than 10^4 under AM1.5 (100 mW/cm²). Junction properties, carrier transport and photogeneration are investigated from dark and illuminated current-voltage and capacitance-voltage characteristics. Results show that the photocurrent collection is bias dependent. S-shaped current-voltage

characteristics under different illumination conditions are observed. High serial resistances around $10^5 \Omega$ are also measured.

NDProA: A FLEXIBLE PLANER FOR SPATIAL REASONING

Jorge Pais^{(a)(b)}; Carlos Pinto-Ferreira^{(a)(b)(c)}

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto de Sistemas e Robótica; ^(c)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *In proceedings of the 5th Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics, SCI2001, vol. 7, pp. 54-59, Orlando, USA, July 2001.*

A pictorial planer named NDProA based on the N-Dimensional Projective Approach for spatial reasoning in n-dimensional spaces is presented. The n-dimensional projective representation is based on simple geometrical concepts and its principal features are, the compression of data in representing physical bodies and the completion and consistency of all projective topological descriptions. The n-dimensional reasoning process is a hierarchical and a multi-level architecture that gave rise to a planer capable of producing pictorial real-time plans named NDProA. Any artificial system that incorporates this planer as part of its reasoning process should be able to interact and adapt in real-time with its external environment.

VELOCITY ESTIMATION OF FAST MOVING TARGETS USING UNDERSAMPLED SAR RAW-DATA

Paulo A. C. Marques^(a); José M. B. Dias^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the Geoscience and Remote Sensing Symposium, IGARSS'01, vol. 4, pp. 1610-1613, Sidney, Australia, July 2001.*

The paper presents a new methodology to retrieve slant-range velocity estimates for moving targets which induce a Doppler-shift beyond the Nyquist limit determined by the Pulse Repetition Frequency (PRF). The

proposed scheme takes advantage of the fact that the range velocity of a moving target induces a Doppler-shift in the azimuth spectra which depends linearly on the fast-time frequency. We present results that take real and simulated SAR data.

PHOTOCARRIER RESPONSE TIME SCANNER

R. Schwarz^(a); M. Fernandes^(b); A. Fantoni^(a); M. Vieira^(b); P. Ferreira^(a); P. Sanguino^(a)

^(a)Instituto Superior Técnico; ^(b)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *19th International Conference on Amorphous and Microcrystalline Semiconductors Science and Technology, ICAMS 19, Nice, France, August 2001, Journal of Non-Crystalline Solids, JNCS, 2001.*

We have used the dependence of the response time after short laser pulses on background light intensity in hydrogenated microcrystalline silicon to study the properties of a two-dimensional image sensor application. A coplanar readout scheme has the advantage of a simple sample structure, however, the signal-to-noise ratio is acceptable only in the perpendicular readout of a p-i-n detector. The response time map reflects the change of both the resistivity and capacitance under varying local illumination. A camera speed of 10 frames per second with a 50 by 50 pixel resolution is reached on a 2 cm² detector.

IMAGE CAPTURE DEVICES BASED ON P-I-N SILICON CARBIDES FOR BIOMETRIC APPLICATIONS

M. Vieira^(a); M. Fernandes^(a); P. Louro^(a); Y. Vygranenko^(a); A. Fantoni^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physikalische Electronic, Stuttgart, Germany.

Publicado em: *19th International Conference on Amorphous and Microcrystalline Semiconductors Science and Technology, ICAMS 19, Nice, France, August 2001, Journal of Non-Crystalline Solids, JNCS, 2001.*

The Laser Scanned Photodiode (LSP) image sensor is optimized and used as a biometric (fingerprint) reader. A laser light illuminates the fingerprint placed on a glass surface in front of the sensor. The reflecting light coming from the glass is projected onto the active surface. The image is converted directly into a proportional electric current using the LSP as fingerprint scanner.

Results show that a trade-off between read-out parameters (fingerprint scanner) and the biometric sensing element structure (p-i-n structure) is needed to minimize the cross talk between the fingerprint ridges (dark regions) and the fingerprint valleys (illuminated regions).

In the optimized configuration and under reverse bias the user-specific information minutiae present a good contrast and a spatial resolution of 20 μm . An increased light to dark sensitivity, a flux range of two orders of magnitude and a responsivity lower than 65 mWcm^{-2} were obtained under reverse voltage.

LASER SCANNED P-I-N PHOTODIODE (LSP) FOR IMAGE DETECTION

M. Vieira^(a); M. Fernandes^(a); J. Martins^(a); P. Louro^(a); A. Maçarico^(a); R. Schwarz^{(a)(b)}; M. Schubert^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico; ^(c)Institut für Physikalische Electronic, Stuttgart, Germany.

Publicado em *IEEE Sensors Journal*, vol. 1, n.º 2, pp. 158-67, August 2001.

Amorphous and microcrystalline glass/ZnO:Al/p(a-Si:H)/i(a-Si:H)/n(a-Si_{1-x}C_x:H)/Al imagers with different n-layer resistivities were produced by Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition technique (PE-CVD). The transducer is a simple large area p-i-n photodiode, an image projected onto the sensing element leads to spatially confined depletion regions that can be readout by scanning the photodiode with a low-power modulated laser beam. The essence of the scheme is the analog readout, and the absence of semiconductor arrays or electrode potential manipulations to transfer the information coming from the transducer. The effect of the image intensity on the sensor output characteristics (sensitivity, linearity, blooming, resolution, and signal-to-noise ratio) are analyzed for different material composition. The results show that the responsivity and the spatial resolution are limited by the conductivity of

the doped layers. An enhancement of one order of magnitude in the image intensity and on the spatial resolution is achieved with a responsivity of 0.2 mW/cm^2 by decreasing the n-layer conductivity by the same amount. In a $4 \times 4 \text{ cm}^2$ LSP sensor the resolution was less than 100 nm and the signal to noise ratio about 32 dB . A physical model supported by electrical simulation gives insight into the methodology used for image representation.

RECURSIVE BAYESIAN PHASE ESTIMATION IN RANGING AND MOBILE COMMUNICATION

José M. N. Leitão^(a); Fernando M. G. Sousa^(b)

^(a)Instituto Superior Técnico; ^(b)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of the IEEE 11th Signal Processing Workshop on Statistical Signal Processing, pp. 202-205, Singapore, August 2001.*

Mobile radio communication systems are generally designed without taking into account the relative emitter/receiver dynamics. In this paper we model this dynamics as a vector Markov process and formulate ranging and digital demodulation/detection as aspects of recursive absolute (not modulo 2π) phase estimation. Symbol-by-symbol detection and phase tracking within symbol interval are performed by a bank of ‘matched’ stochastic nonlinear estimators and a maximum a posteriori (MAP) decision algorithm. The approach applies to precision landing and communication with Low Earth Orbit (LEO) satellites or between rapid maneuvering platforms.

SHAPE TRACKING USING CENTROID-BASED METHODS

Arnaldo J. Abrantes^(a); Jorge S. Marques^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto de Sistemas e Robótica, Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Third International Workshop – Energy Minimization Methods in Computer Vision and Pattern Recognition, Springer, Lecture*

Notes in Computer Science, vol. 2134, pp. 576-591, Sophia Antipolis, France, September 2001.

Algorithms for tracking generic 2D object boundaries in a video sequence should not make strong assumptions about the shapes to be tracked. When only a weak prior is at hand, the tracker performance becomes heavily dependent on its ability to detect image features; to classify them as informative (i.e., belonging to the object boundary) or as outliers; and to match the informative features with corresponding model points. Unlike simpler approaches often adopted in tracking problems, this work looks at feature classification and matching as two unsupervised learning problems. Consequently, object tracking is converted into a problem of dynamic clustering of data, which is solved using competitive learning algorithms. It is shown that competitive learning is a key technique for obtaining accurate local motion estimates (avoiding aperture problems) and for discarding the outliers. In fact, the competitive learning approach shows several benefits: (i) a gradual propagation of shape information across the model; (ii) the use of shape and noise models competing for explaining the data; and (iii) the possibility of adopting high dimensional feature spaces containing relevant information extracted from the image. This work extends the unified framework proposed by the authors elsewhere.

AUTOMATIC TRACKING OF MULTIPLE PEDESTRIANS WITH GROUP FORMATION AND OCCLUSIONS

Pedro M. Jorge^(a); Arnaldo J. Abrantes^(a); Jorge S. Marques^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto de Sistemas e Robótica, Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the IASTED International Conference, Visualization, Imaging and Image Processing, VIIP 2001, pp. 613-618, Marbella, Spain, September 2001.*

This work addresses the problem of automatic tracking of pedestrians observed by a fixed camera in outdoor scenes. Tracking isolated pedestrians is not a difficult task. The challenge arises when the tracking system has to deal with temporary occlusions and groups of pedestrians. In both cases it is not possible to track each pedestrian during the whole video sequence. However, the system should be able to recognize each

pedestrian as soon as he/she becomes visible and isolated from the group. This paper presents methods to tackle with these difficulties. The proposed system is based on a hierarchical approach, which allows the application of the same methods for tracking isolated pedestrians and groups.

IMAGING OF FAST MOVING TARGETS USING UNDERSAMPLED SAR RAW-DATA

Paulo A. C. Marques^(a); José M. B. Dias^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the 2001 International Conference on Image Processing, ICIP 2001, vol. 3, pp. 624-627, Thessaloniki, Greece, October 2001.*

In this paper we propose a novel methodology to estimate the true velocity of fast moving targets using a single synthetic aperture radar sensor without increasing the Pulse Repetition Frequency. The basic reasoning is that, although the returned echoes may be aliased in the azimuth direction, its phase is informative with respect to the moving target trajectory parameters. We will use this knowledge to retrieve the necessary information to achieve focused images of fast moving targets on their correct azimuth positions.

CARRIER TRACKING AND SYMBOL TIMING IN HIGHLY ACCELERATIVE MOBILE COMMUNICATIONS

Fernando M. G. Sousa^(a); José M. N. Leitão^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the 7th International Workshop on Digital Signal Processing Techniques for Space Communication, DSP 2001, pp. P2.8/1- 8, Sesimbra, Portugal, October 2001.*

Mobile radio communication systems are generally designed without taking into account the relative emitter/receiver dynamics. This paper

formulates ranging and communication as a bayesian recursive estimation problem in additive white gaussian noise channels. Phase variations due to relative emitter/receiver motion are modeled as a third order Gauss-Markov process. Symbol-by-symbol detection and phase tracking are performed by a receiver open-loop structure consisting of a bank of stochastic ‘matched’ nonlinear filters and a maximum a posteriori decision algorithm. Simulation results, including highly accelerative dynamics, are presented showing the possibilities of the proposed approach.

REDUCING THE NUMBER OF SAR SENSORS NEEDED TO RETRIEVE THE COMPLETE VELOCITY VECTOR OF MOVING TARGETS

Paulo A. C. Marques^(a); José M. B. Dias^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the 7th International Workshop on Digital Signal Processing Techniques for Space Communication, DSP 2001, pp. P2.7/1-8, Sesimbra, Portugal, October 2001.*

This paper presents a novel method to determine the complete velocity vector of a moving target using a single Synthetic Aperture Radar (SAR) sensor. The method exploits the structure of the returned echo from a moving target: in the slow-time frequency domain, it is a scaled and shifted replica of the antenna radiation pattern immersed in Gaussian noise; the scale and the shift are related with the slant-range and the cross-range velocities, respectively. A Bayesian approach is then adopted to derive an estimator for the velocity vector. Simulation results illustrating the estimator effectiveness are presented.

FITTING AUTONOMY AND MOBILE AGENTS

Walter Vieira^(a); L. M. Camarinha-Matos^(b); Luis O. Castolho^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Universidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia.

Publicado em: *Proceedings of the 8th IEEE International Conference on Emerging Technologies and Factory Automation, IEEE Catalog Number: 01TH8597, pp. 471-480, Juan-les-Pins, France, October 2001.*

This paper describes the concept of fitting autonomy for remote operation systems, which means that the autonomy of the remote place is defined in a case-by-case basis, taking into account the requirements of the applications and the characteristics of the communication channels. Thus high levels of flexibility and independence on the characteristics of the communication channels are achieved. An architecture for mobile agents equipped with execution supervision is adopted as a solution to implement this approach. An application of these concepts in the context of the remote manipulation of a robot through the Internet is described.

AGENTES MÓVEIS EM OPERAÇÃO REMOTA: UMA APLICAÇÃO EM TELE-ROBÓTICA

Walter Vieira^(a); L. M. Camarinha-Matos^(b); Luis O. Castolho^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b)Universidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia.

Publicado em: *Robótica, n.º 45, pp. 40-48, Portugal, 4.º trimestre 2001.*

Neste artigo é apresentado o uso de agentes móveis adaptáveis na operação remota, permitindo respostas em tempo real apesar das limitações dos canais de comunicação, tais como os atrasos de tempo, a sua pouca disponibilidade e falta de segurança. É proposta uma arquitectura envolvendo agentes estacionários e agentes móveis autónomos, com capacidade de monitoração de execução e recuperação de erros. As aplicações potenciais abrangem desde a tele-robótica tradicional até os laboratórios virtuais ou assistência à terceira idade, onde os agentes móveis prestam assistência aos utilizadores em comunidades virtuais. Também são apresentados os resultados práticos num cenário onde um robô tipo SCARA é comandado remotamente através da Internet.

MYSDI: A GENERIC ARCHITECTURE TO DEVELOP SDI PERSONALISED SERVICES (HOW TO DELIVER THE RIGHT INFORMATION TO THE RIGHT USER?).

J. C. Ferreira^(a); Alberto Silva^(b)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Electrónica e Telecomunicações e de Computadores, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1, 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jferreira@deec.isel.ipl.pt, Fax +351 21 8317114;

^(b) Universidade Técnica de Lisboa, DEI – Instituto Superior Técnico, Departamento Engenharia Informática, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa Codex, Portugal, Email: alberto.silva@acm.org.

Publicado em: *Proceedings of the ICEIS'2001. Setubal, Portugal. Julho 2001*

We introduce in this paper a generic architecture to deal with the general problem: “How to Deliver the Right Information to the Right User?”. We discuss this issue through the proposal of our SDI (Selective Dissemination of Information) Personalised Architecture, called MySDI, which is based on the software agent paradigm as well as on information retrieval techniques. In order to clarify and validate this proposal we also introduce in this paper a prototype service, called MyGlobalNews, which should be a public service to provide personalised news. Stability analysis of cosmological models through Liapunov's method

STABILITY ANALYSIS OF COSMOLOGICAL MODELS THROUGH LIAPUNOV'S METHOD

Tiago Charters de Azevedo^(a); Ana Nunes^(b); José P. Mimoso^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1 1949-014 Lisboa, Portugal;

^(b)Faculdade de Ciências da UL / Departamento de Física, Centro de Matemática e Aplicações Fundamentais de UL;

^(c)Faculdade de Ciências da UL / Departamento de Física, Centro de Física Nuclear da UL/Gravitação e Cosmologia.

Publicado em: *Class.Quant.Grav. 18 (2001) 1703-1714*

We investigate the general asymptotic behaviour of Friedman-Robertson-Walker (FRW) models with an inflaton field, scalar-tensor FRW

cosmological models and diagonal Bianchi-IX models by means of Liapunov's method. This method provides information not only about the asymptotic stability of a given equilibrium point but also about its basin of attraction. This cannot be obtained by the usual methods found in the literature, such as linear stability analysis or first order perturbation techniques. Moreover, Liapunov's method is also applicable to non-autonomous systems. We use this advantage to investigate the mechanism of reheating for the inflaton field in FRW models.

SCALING SOLUTIONS FROM INTERACTING FLUIDS

Ana Nunes^(a); José P. Mimoso^(b), Tiago Charters de Azevedo^(c)

^(a)Faculdade de Ciências da UL / Departamento de Física, Centro de Matemática e Aplicações Fundamentais de UL;

^(b)Faculdade de Ciências da UL / Departamento de Física, Centro de Física Nuclear da UL/Gravitação e Cosmologia.

^(c)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N° 1 1949-014 Lisboa, Portugal.

Publicado em: *Phys.Rev. D63 (2001) 083506*

We examine the dynamical implications of an interaction between some of the fluid components of the universe. We consider the combination of three matter components, one of which is a perfect fluid and the other two are interacting. The interaction term generalizes the cases found in scalar field cosmologies with an exponential potential. We find that attracting scaling solutions are obtained in several regions of parameter space, that oscillating behaviour is possible, and that new curvature scaling solutions exist. We also discuss the inflationary behaviour of the solutions and present some of the constraints on the strength of the coupling, namely those arising from nucleosynthesis.

REMOTE CONTROL SYSTEMS LABORATORY

P. M. Silva^{(a)*}; J. M. F. Calado^{(a)**}; J. M. G. Sá da Costa^(b); V. M. Becerra^(c)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1, 1949-014 Lisboa, Portugal, *Email: psilva@dem.isel.ipl.pt, **Email: jcalado@dem.isel.ipl.pt, Tel. +351 21 8317083, Fax +351 21 8317057;

^(b) Universidade Técnica de Lisboa, IDMEC – Instituto Superior Técnico, Grupo de Controlo, Automação e Robótica, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa Codex, Portugal, Email: sadacosta@dem.isl.utl.pt, Tel. +351 21 8417187, Fax +351 21 8498097;

^(c) The University of Reading Department of Cybernetics, Whyteknight's Reading RG6 6AY, United Kingdom Email: v.m.becerra@reading.ac.uk, Tel: +44 (0) 118 931 6703, Fax: +44 (0) 118 931 8220

Publicado em: *Actas da IFAC Workshop IBCE'01 – Internet Based Control Education, pp. 31-36, Madrid, Espanha, Dezembro 2001.*

Control systems theory can be a discipline difficult to learn without some laboratory help. With the help of focused laboratories this discipline turns to be very interesting to the students involved. The main problem is that laboratories aren't always available to students, and sometimes, when they are available, aren't big enough to a growing student population. Thus, with computer networks growing so fast, why don't create remote control labs that can be used by a large number of students? Why don't create remote control labs using Internet?

FAULT DIAGNOSIS OF INDUSTRIAL ACTUATORS IN A SUGAR FACTORY: A EUROPEAN STUDY

M. Bartys^(a); J. Calado^(b); R. Patton^(d); J. Quevedo^(d)

^(a)Warsaw University of Technology; ^(b)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(c)The University of Hull; ^(d)Universitat Politècnica de Catalunya.

Publicado em: *Actas do IEE Seminar on Intelligent and Self-Validating Instruments (Sensors and Actuators), pp. 5/1-5/10, IEE Savoy Place, Londres, Reino Unido, 14 de Dezembro de 2001.*

The likelihood that actuator systems (e.g. control valves, servo-motors, positioners) will malfunction is significant when these components are installed in harsh environments. The determination of the development of small (incipient – hard to detect) faults before they become serious clearly has an important influence on the actuator's predicted lifetime. On-line diagnosis of actuation systems (and, indeed sensor elements) can

be achieved either via a remote supervisory system or autonomously using a micro-controller as a part of the intelligent actuator itself. Indeed, both approaches to diagnosis are necessary for total process surveillance. During the last two decades the literature is full of methods for fault detection and isolation (FDI) based on the use of models or statistics in one way or another. Bearing in mind the background of these methods and the general drive towards intelligent instruments, this paper describes an engineering research study into the technology requirements and the methods that can be used to detect and uniquely isolate 19 fault types in an electro-pneumatic valve actuator in a sugar factory at Lublin, Poland.

A GUERRA GLOBAL

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística Hoje, N.º 35, Novembro/Dezembro de 2001, Revista patrocinada pela APLOG (Associação Portuguesa de Logística), Lisboa, 2001, pp. 64 e 65.*

A emergente globalização que colocou meios formidáveis nas mãos de todos, sejam quais forem as suas intenções ou o seu estágio de desenvolvimento ou valores, tornou inevitável uma nova guerra, mundial tal como as anteriores mas, transversal e assimétrica relativamente às fronteiras aos objectivos e aos métodos. Estamos agora face a uma guerra global, que envolve as civilizações e os valores e que confronta no mesmo espaço-tempo, simultaneamente, o passado e o presente, estádios diferentes do desenvolvimento humano e divergentes projectos de sociedade. Trata-se, sem dúvida, de uma guerra global. Estratégia, logística e operações militares desde há muitos séculos que se desenvolveram em conjunto; elas constituem as três vertentes holísticas do mesmo objecto, a guerra, que parece ter preparado um novo encontro com a História, agora, no dealbar do século XXI e em tempos de pensar e agir de maneira global.

A LOGÍSTICA E AS NECESSIDADES De ENSINO EM PORTUGAL

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N.º 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Economia e Prospectiva*, N.º 18, Out./Dez. 2001, subordinado ao tema “As Logísticas”, GEPE (Gabinete de Estudos e Prospectiva Económica), Ministério da Economia, Lisboa, 2001, pp. 107 a 113.

Procura-se saber em que medida o modelo de ensino actualmente em vigor no nosso país corresponde ao que se antevê serem as necessidades dos sistemas logísticos que vão suportar a economia portuguesa a curto e médio prazo; diagnosticam-se eventuais pontos fracos e prospectivam-se possíveis soluções.

CONTRIBUTO PARA UMA REFLEXÃO ACERCA DA LOGÍSTICA EM PORTUGAL

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N.º 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Revista da APAT (Associação Portuguesa dos Agentes e Transitários)*, N.º 18, Out./Dez. 2001, Lisboa, 2001, pp. 10 e 11.

De maneira a poderem ser delineadas estratégias coerentes e exequíveis, Portugal, o seu Governo e as respectivas autoridades, os agentes empresariais privados dos mais variados sectores de actividade, bem como as universidades que realizam investigação deveriam compreender, tão adequadamente quanto possível, os mecanismos, parâmetros e variáveis que influenciam o fenómeno da circulação física das mercadorias, dos capitais e da informação, num mundo cada vez mais globalizado, integrado e, também, diversificado, tanto a nível planetário como ao nível do continente europeu como, até, na própria Península Ibérica em que o país se insere.

GNV EM PORTUGAL: ASPECTOS TECNOLÓGICOS E PERSPECTIVAS FUTURAS

Isabel S. Carvalho^(a); Ricardo Santos^(a)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

Publicado em: *1.^{as} Jornadas Politécnicas de Engenharia Mecânica, Automóvel, Gestão Industrial e Ambiente, Leiria, Portugal, Novembro 2001.*

A implantação do Gás Natural Veicular, GNV, em Portugal está presentemente a ser considerada como uma alternativa aos combustíveis tradicionais na área dos transportes, especificamente na área dos transportes públicos e de frotas, uma vez que apresenta vantagens significativas aos níveis da Economia, da Poluição Ambiental e da Segurança, entre outros.

O presente artigo analisa a actual situação de utilização do GNV em Portugal, e efectua uma comparação de cenários a nível europeu e mundial. Pretende-se estabelecer uma comparação entre a utilização do GNV com a de outros combustíveis tradicionais, listando e analisando as vantagens e desvantagens do ponto de vista tecnológico, económico e ambiental.

Existem várias classes de veículos a GN, sendo as que apresentam maior potencial para aplicação em veículos ligeiros as de motorização *bi-fuel* e *dedicada*. Assim, é em torno destas duas classes que se desenvolve este artigo, analisando o desempenho de veículos recorrendo à sua comparação em termos de potência, eficiência, tipo de combustão e emissão de poluentes. Surge, ainda, uma breve referência ao sistema de alimentação de combustível e ao sistema EOBD.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO COMPORTAMENTO DINÂMICO DE ESTRUTURAS EM MATERIAIS COMPÓSITOS

Adolfo Pedradas^(a); Zuzana Dimitrovová^(b); João Travassos^(c)

^(a,b,c)Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Projecto Mecânico, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas do 4º Encontro Nacional de Análise Experimental de Tensões e Mecânica Experimental, pp.33-34, Bragança, Outubro de 2001.*

O objectivo do presente trabalho consiste na optimização, de uma casca axi-simétrica com reforços radiais e numa peça em liga de alumínio para distribuição do carregamento visando a maximização da resistência à fadiga. Na determinação de carga de rotura é importante distinguir os diferentes modos de possível falha, que poderá ser originada pela delaminação ou fractura da parte compósita, ou ainda originada pela separação entre a componente metálica e a compósita.

Para atingir o objectivo deste trabalho procedeu-se à implementação da análise experimental de tensões recorrendo à extensometria eléctrica por resistência no ISEL. Através da análise numérica em ANSYS pelo método dos elementos finitos foram criados dois modelos: o modelo composto pelas superfícies discretizado em elementos de casca multicamada e o modelo formado por sólidos. Os primeiros ensaios experimentais foram feitos para uma carga estática simples com o objectivo de escolher o modelo dos elementos finitos mais adequado.

O MOMENTO ESTÁTICO NULO

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística Hoje, N.º 34, Setembro/Outubro de 2001, Revista patrocinada pela APLOG (Associação Portuguesa de Logística), Lisboa, 2001, pp. 50 e 51.*

Uma das mais importantes consequências do teorema geral dos momentos e que advém da aplicação de uma funcional matemática designada, em mecânica racional, pela «Funcional Momento» é que, nos centros de massa, o vector momento estático (o primeiro momento) é nulo. Tal significa que para se sair ou chegar aos centros de massa tem de se consumir tanto mais energia quanto maiores forem, quer a massa envolvida, quer a distância a percorrer. Quanto mais longe e mais massa, maior será a necessidade de energia e, logo, maior o custo e o consumo de recursos.

INDUSTRIAL ACTUATOR DIAGNOSIS USING HIERARCHICAL FUZZY NEURAL NETWORKS

M. J. G. C. Mendes^(a); J. M. F. Calado^(a); J. M. C. Sousa^(b); J. M. G. Sá da Costa^(b)

^(a) Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Estudos de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: mmendes@dem.isel.ipl.pt, Tel.: +351 218 317 083, Fax: + 351 218 317 057, e-mail: jcalado@dem.isel.ipl.pt

^(b) Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, GCAR/IDMEC, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal, Tel.: + 351 218 417 471, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: j.sousa@dem.ist.utl.pt, Tel.: + 351 218 417 187, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Actas da ECC'2001 - European Control Conference, pp. 2723-2728, Porto, Portugal, Setembro 2001.*

In this paper a hierarchical structure of fuzzy neural networks (FNNs) and how to train it for fault diagnosis given an appropriate data patterns, are presented. Fault symptoms concerning multiple simultaneous faults are harder to learn than those associated with single faults. Furthermore, the larger the set of faults, the larger the set of fault symptoms will be and, hence, the longer and less certain the training outcome. In order to overcome this problem, the proposed approach has a hierarchical structure of three levels where several FNNs are used. Thus, a large number of patterns are divided into many smaller subsets so that the classification can be carried out more efficiently. One of the advantages of this approach is that multiple faults can be detected in new data even if the network is trained only with data representing single abrupt faults. A continuous binary distillation column having several actuated valves with PID loops has been used as test bed for the proposed approach.

A REAL-TIME CONTROL ARCHITECTURE FOR A PUMA ROBOT

F. M. Campos

Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Estudos de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 057, e-mail: fcampos@dem.isel.pt

Publicado em: *Actas da ECC 2001, Student Forum - European Control Conference, pp. 71-74, Porto, Portugal, Setembro 2001.*

This paper describes a PC-based open architecture controller for an industrial robot that uses QNX as the real-time operating system. This control system implements joint control of PUMA 560 robot which was retrofitted to interface a standard PC. The system demonstrates that a PC running a real-time operating system can be used as a reliable and flexible platform for position and force control of a PUMA industrial robot. The preliminary experimental results with position control have shown good control performance.

INDUSTRIAL PROCESS IDENTIFICATION

P.M. Silva

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N° 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: psilva@dem.isel.pt, Tel. +351 21 8317083, Fax +351 21 8317057

Publicado em: *Actas da ECC'01, Student Forum – European Control Conference, pp. 75-78, Porto, Portugal, Setembro 2001.*

Many non-linear identification methods, are appearing very rapidly. These methods need to be exploited, tested and experimented intensively. It's important to evaluate the capacity of this methods and to compare the results with the classical linear methods of identification. During the current studies a pilot plant has been used as test bed of some linear and non-linear identification methods and, therefore, a result comparison is provided.

A SEMI-ANALYTICAL APPROACH TO THE RELATIVE PERMEABILITY DETERMINATION IN LCM PROCESSES

Zuzana Dimítrovová*; **Suresh G. Advani⁺**

^(a)IDMEC, Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal; ^(b)Department of Mechanical Engineering, University of Delaware, Newark, USA

Publicado em: *Actas de 8th International Conference on Composites Engineering, pp. 191-192, Tenerife, Ilhas Canárias, Espanha, Agosto 2001.*

Liquid Composite Molding (LCM) processes inject resin into a stationary bed of fiber preforms to manufacture fiber reinforced composites. Infiltration of the resin into empty spaces between the fibers is driven by the hydrodynamic pressure gradient originated by the inlet pressure. Sometimes, when the resistance of the preforms to resin flow is so high that in certain regions the hydrodynamic pressure can become very low. This causes the capillary pressure to exceed it and the driving mechanism of the flow will change. This is plausible when preforms consisting of fiber tows are used, where the spacing between the fiber tows is an order of magnitude higher than the spacing of pores inside the tows, forming dual porosity preforms. Little attention has been paid to unsaturated flows in dual scale porous media, where during infiltration a transition (partially filled) region is clearly visible, predicting that standard approaches to numerical simulation of filling phase using sharp resin front will not give satisfactory results. In order to describe the transition region, first of all, it is necessary to modify the macroscopic governing equations by introducing the relative permeability, k , and the macroscopic capillary pressure, P_c , as functions of the saturation, s . New methodology to determine these characteristics is presented.

NEURO-FUZZY TECHNIQUES IN FDI SYSTEM FOR SUGAR FACTORY ACTUATORS

M. J. G. C. Mendes^(a); M. Kowal^(b); J. Korbicz^(b); J. M. G. Sá da Costa^(c)

^(a) Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Estudos de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: mmendes@dem.isel.ipl.pt;

^(b) University of Zielona Góra, Institute of Control and Computation Engineering, ul. Podgórna 50, 65-246 Zielona Góra, Poland Tel.: +48 68 3282384, Fax: + 48 68 3254615, e-mail: M.Kowal@issi.uz.zgora.pl, Tel.: +48 68 3282422, Fax: + 48 68 3254615, e-mail: M.Kowal@issi.uz.zgora.pl, Tel.: +48 68 3282422, Fax: + 48 68 3254615, e-mail: J.Korbicz@issi.uz.zgora.pl

^(c) Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, GCAR/IDMEC, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal, Tel.: + 351 218 417 187, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Actas da 2ª DAMADICS Vacation School – Neuro-Fuzzy Methods for Modelling and Fault Diagnosis, Lisboa, Portugal, Agosto 2001.*

Fault diagnosis systems have an important role in industrial plants because the early fault detection and isolation (FDI) can minimise damages in the plants. The main aim of this work is to propose a two-stage neuro-fuzzy approach as a fault diagnosis system in dynamic processes. The first stage of the system is responsible for fault detection and is implemented using a neuro-fuzzy model. The second stage of the system is responsible for fault isolation and is built using a hierarchical structure of fuzzy neural networks. The FDI system is applied to fault diagnosis in the sugar factory actuators.

«REVERSE LOGISTICS»

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N.º 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística Hoje, N.º 33, Julho/Agosto de 2001, Revista patrocinada pela APLOG (Associação Portuguesa de Logística), Lisboa, 2001, p. 52.*

Perguntar-se-á, em primeiro lugar, qual a diferença entre a tradicional “forward logistics” e a emergente “reverse logistics”. Poderá concluir-se que a distinção entre uma e outra não é mais do que a própria questão da direcção entre as respectivas cadeias.

O ENCALHE DO SECTOR PORTUÁRIO

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N.º 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística Hoje, N.º 32, Maio/Junho de 2001, Revista patrocinada pela APLOG (Associação Portuguesa de Logística), Lisboa, 2001, p. 70.*

Para poder caracterizar, sintetizadamente, o que foi a última década no sector portuário nacional, há quem afirme ter havido, nesse íterim, dois momentos culminantes que foram a reforma portuária de 1993 e o «Livro

Branco» para o sector “Marítimo-Portuário” divulgado no início de 1997. Pretende evidenciar-se, neste artigo, que o segundo pouco mais teve que o respectivo impacte mediático.

SHAPE OPTIMIZATION OF ELASTO-PLASTIC BODIES

Zuzana Dimitrovová

IDMEC, Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Applications of Mathematics*, vol. 46, pp. 81-101, April 2001.

Existence of an optimal shape of a deformable body made from a physically nonlinear material, obeying a specific nonlinear generalized Hooke's law (in fact, the so called deformation theory of plasticity is invoked in this case) is proved. The approximation of the problem by finite elements is also discussed.

ALTA VELOCIDADE A MARCAR PASSO

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística Hoje*, N.º 31, Março/Abril de 2001, Revista patrocinada pela APLOG (Associação Portuguesa de Logística), Lisboa, 2001, p. 56.

A emergência da mundialização das economias e a explosão das redes da informação, está simultaneamente a globalizar e a acelerar a circulação física das mercadorias e a própria mobilidade das populações, que neste final de século e de milénio, assumem proporções nunca antes previstas ou imaginadas, pondo, eventualmente, em causa, na Europa, a necessidade prática da existência de muitos dos velhos Estados-nação. Estando neste momento em causa as ligações ferroviárias estratégicas de Portugal a Madrid e ao centro da Europa, amarrando-se à decisão muito do que pode afectar ou hipotecar as gerações futuras, como é que se está a encarar, hoje, tão importante problema.

EDUCAÇÃO E LOGÍSTICA

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística XXI, N.º 3, Fevereiro de 2001, Lisboa, 2001, p. 16.*

Sendo a logística, por excelência, a actividade do valor acrescentado, que começa e acaba com a satisfação do cliente/consumidor, ela não é, nem poderia ser, albergue de mão-de-obra indiferenciada ou pouco qualificada. Pelo contrário, as actividades de «procurement», de produção, distribuição, transportes e outras, exigem cada vez mais o recurso a quadros altamente qualificados, em aprendizagem permanente, de maneira a fazer face à sistemática mudança que se verifica nos métodos e processos de trabalho, agora que a própria logística se «webisou» e geminou com a «e-logística», se globalizou e enfrenta desafios tremendos num terreno onde a concorrência é implacável e só sobrevivem os mais aptos e os que tiverem mais sorte (que custa muito a alcançar).

GLOBALIZAÇÃO E IMPOSTOS

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, Nº 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística Hoje, N.º 30, Janeiro/Fevereiro de 2001, Revista patrocinada pela APLOG (Associação Portuguesa de Logística), Lisboa, 2001, p. 56.*

Foram os portugueses que, há mais de quinhentos anos, iniciaram a partir da Europa um irreversível processo de globalização quando entraram em contacto com culturas e civilizações ao tempo desconhecidas. Foram então capazes de internacionalizar o comércio, estabelecer entrepostos e feitorias, encurtando no tempo e no custo, ou seja, valorizando os produtos exóticos dos continentes distantes que os principais mercados europeus pretendiam adquirir. Sem o saber inventaram a logística global.

A COMPRESSÃO DO TEMPO

João Carlos Quaresma Dias

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N.º 1 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: jdias@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Logística XXI, N.º 2, Janeiro de 2001, Lisboa, 2001, p. 16.*

Ocorreu nas empresas e organizações, nos últimos anos, sem dúvida, uma notável mudança de paradigma na gestão, que consiste no seguinte facto essencial: em vez de se privilegiar a compressão dos custos passou-se a gerir no sentido da compressão do tempo, reduzindo-se assim os «lead-times» de entrega do produto ao cliente/consumidor final.

SOFT COMPUTING APPROACHES TO FAULT DIAGNOSIS FOR DYNAMIC SYSTEMS

J. M. F. Calado^(a); J. Korbicz^(b); K. Patan^(b); R. J. Patton^(c); J. M. G. Sá da Costa^(d)

^(a)IDMEC/ISEL – Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Polytechnic Institute of Lisbon, Rua Cons. Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal;

^(b)Institute of Control and Computation Engineering, Technical University of Zielona Góra, ul. Podgórna 50, 65-246 Zielona Góra, Poland;

^(c)Control and Intelligent Systems Engineering, Faculty of Engineering and Mathematics, The University of Hull, Cottingham Road, Hull HU6 7RX, United Kingdom;

^(d)IDMEC/IST – Instituto Superior Técnico, Technical University of Lisbon, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal.

Publicado em: *European Journal of Control, pp. 248-286, Vol. 7, No. 2-3.*

Recent approaches to fault detection and isolation for dynamic systems using methods of integrating quantitative and qualitative model information, based upon soft computing (SC) methods are surveyed and studied in some detail. SC methods are considered an important extension to the quantitative model-based approach for residual generation in fault detection and isolation (FDI). When quantitative models are not readily available, a correctly trained neural network (NN) can be used as a non-linear dynamic model of the system. The paper describes some powerful NN methods taking into account the dynamic as well as non-linear system behaviour. Sometimes, further insight is

required as to explicit behaviour of the model-involved and it is then that fuzzy and even neuro-fuzzy methods come to their own data-driven FDI applications. The paper also discusses the use of evolutionary programming tools for observer and NN design. The paper provides many powerful examples of the use of SC methods for achieving good detection and isolation of faults in the presence of uncertain plant behaviour, together with their practical value for fault diagnosis of real process systems.

INTERACÇÃO DE UM COMPLEXO POLI-HIDRETO DE MOLIBDÉNIO COM CIANAMIDAS

Luísa Martins^{a, b}; Armando Pombeiro^a

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Livro de Abstracts da V Conferência de Química Inorgânica, pp. 43, Monte Real, Portugal, Abril 2001.*

Um dos interesses do estudo de complexos poli-hidretos de molibdénio advém do facto de que a redução do diazoto pela enzima molibdo-nitrogenase poderá ocorrer num único centro de Mo o qual poderá ter ligandos hidretos susceptíveis de remoção pelo diazoto.¹ No entanto, a reactividade destes complexos poli-hidretos com moléculas pequenas de azoto insaturado está ainda pouco explorada.

Assim, no sentido de investigar a activação da cianamida ($\text{N}\equiv\text{CNH}_2$), um reconhecido substrato da nitrogenase, por coordenação a um centro de molibdénio, após se ter observado que a cianamida é capaz de sofrer desidrogenação induzida por um centro electronicamente rico de Mo(0) ou W(0),² foi realizado o estudo da reactividade do hidreto-complexo $[\text{MoH}_4(\text{dppe})_2]$ ($\text{dppe} = \text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2$) com cianamida, cianoguanidina ou organocianamidas, o que conduziu à obtenção da série de complexos $[\text{MoH}_2(\text{NCR})_2(\text{dppe})_2][\text{BF}_4]_2$ ($\text{R} = \text{NH}_2, \text{NMe}_2, \text{NEt}_2$ or $\text{NC}(\text{NH}_2)_2$). São discutidas as suas propriedades espectroscópicas e o seu comportamento electroquímico.

REDOX BEHAVIOUR OF ALKYNOL-DERIVED ALLENYLIDENE COMPLEXES OF IRON(II)

Ana Venâncio^a; Luísa Martins^{a, b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Livro de Abstracts do VI Encontro Ibérico de Electroquímica e XI Encontro da Sociedade Portuguesa de Electroquímica, pp. P-B2, Porto, Portugal, Abril 2001.*

The electrochemical behaviour of the complexes *trans*-[FeBr(L)(depe)₂][BF₄] with an allenylidene ligand (=C=C=CR¹R²) L = CCC(Me)Ph, CCCPh₂, CCCEt₂, derived from the reaction of the appropriate alkynol with a parent iron complex, has been investigated by cyclic voltammetry (CV), in 0.2M [NBu₄][BF₄]/CH₂Cl₂, at a Pt-wire. The complexes exhibit two successive anodic waves at *ca.* 0.90 to 1.20 V *vs.* S.C.E., followed by a third one at a higher potential (*ca.* 1.60 - 1.70 V *vs.* S.C.E.).

From the E₂^{ox} values measured for these complexes and the knowledge of the E_s (electron-richness) and β (polarizability) parameters [1] for the binding *trans*-{FeBr(depe)₂}⁺ metal centre, it was possible, for the first time, to estimate the P_L parameter for the allenylidene ligands whose net electron-donor character is thus compared with related species such as nitriles and vinylidenes.

In addition, the corresponding values for the Lever E_L ligand parameter [3] were also estimated.

REDOX BEHAVIOUR OF A BISCYANAMIDE-DIHYDRIDE Mo COMPLEX, A PRELIMINARY STUDY

Elisabete Bastos^{a,b}; Luísa Martins^{a,b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Livro de Abstracts do VI Encontro Ibérico de Electroquímica e XI Encontro da Sociedade Portuguesa de Electroquímica, pp. P-B6, Porto, Portugal, Abril 2001.*

The electrochemical behaviour of the biscyanamide-dihydride complex [MoH₂(NCNH₂)₂(dppe)₂][BF₄]₂ (dppe = Ph₂PCH₂CH₂PPh₂) was studied by cyclic voltammetry (CV) in 0.2 M [NBu₄][BF₄]/THF, at a Pt-disc electrode at room temperature.

This complex exhibits, by CV, one single-electron reversible oxidation at E_{1/2}^{ox} = 1.0 V *vs.* S.C.E. and three irreversible cathodic waves at ^IE_p^{red} = -0.68, ^{II}E_p^{red} = -0.85 and ^{III}E_p^{red} = -1.53 V *vs.* S.C.E..

In addition, a new irreversible anodic wave at E_p^{ox} = 0.67 V *vs.* S.C.E. is observed upon scan reversal following the cathodic scan, as well as on addition of base ([NBu₄]OH). This is interpreted by considering an electrode process involving partial dehydrogenation.

Combined electrochemical and chemical studies are being performed in order to identify the dehydrogenation product(s) and to establish the mechanism of the redox process.

REDOX BEHAVIOUR OF A BISCYANAMIDE-DIHYDRIDE Mo COMPLEX, A PRELIMINARY STUDY

Elisabete Bastos^{a,b}; Luísa Martins^{a,b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Portugaliae Electrochim. Acta*, vol. 19, pp. 357-360, 2001.

The cyclic voltametric behaviour of the biscyanamide-dihydride Mo complex $[\text{MoH}_2(\text{NCNH}_2)_2(\text{dppe})_2][\text{BF}_4]_2$ (dppe = $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2$) is reported and interpreted by considering the occurrence of a cathodically-induced monodehydrogenation process of the cyanamide ligand.

ESTIMATE OF ELECTROCHEMICAL LIGAND PARAMETERS IN IRON (II) ADDUCTS OF $[\text{FeH}(\text{CN})(\text{dppe})_2]$

Sílvia S. P. R. Almeida^{a,b}; João J. R. Fraústo da Silva^a and Armando J. L. Pombeiro^a

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Portugaliae Electrochim. Acta*, 19, 371-376, 2001 e no livro dos abstracts do VI Encontro Ibérico de Electroquímica/ XI Encontro da Sociedade Portuguesa de Electroquímica.

Treatment of a solution of *trans*- $[\text{FeH}(\text{CN})(\text{dppe})_2]$ **1** (dppe = $\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2$) with HBF_4 , MeI, $[\text{Et}_3\text{O}][\text{BF}_4]$ or $\text{ClC}(=\text{O})\text{Ph}$ leads to the protonation, alkylation or acylation of the ligating cyanide to form the corresponding isocyanide compounds *trans*- $[\text{FeH}(\text{CNR})(\text{dppe})_2]\text{A}$ **2** [R = H (2a) or Et (2b), A = BF_4 ; R = Me (2c), A = I; R = $\text{C}(\text{O})\text{Ph}$ (2d), A = Cl], whereas the reaction of **1** with BF_3 , BPh_3 , $[\text{VC}_3(\text{thf})_3]$ or

[NiCl₂(PCy₃)₂] affords the neutral adducts *trans*-[FeH(CN→X)(dppe)₂] **3** [X = BF₃ (**3a**), BPh₃, (**3b**), VC₆(thf)₂ (**3c**) or NiCl₂(PCy₃) (**3d**)].

The electrochemical behaviour of compounds **1**, **2**, and **3** was studied by cyclic voltammetry (CV) and controlled potential electrolyses (CPE) in 0.2 M [NBu₄][BF₄]/CH₂Cl₂ (or thf), at a Pt-disc or –gauze electrode, respectively. They exhibit, by CV, a reversible (with the exception of **2d**) single – electron anodic process at potential values in the range 0.30 – 1.32 V *vs.* SCE. From the values of oxidation potential measured for these compounds and the knowledge of the *E_s* (electron – richness) and *b* (polarizability) parameters [1] for the {FeH(CN)(dppe)₂} metal centre, we have estimated the *P_L* parameters for the CNR or CN→ X ligands. The corresponding values of the Lever *E_L* ligand parameter [2] were also estimated by applying Lever’s empirical expression that relates the redox potential of the complex with the sum of the electrochemical *E_L* ligand parameter for all the ligands (Σ*E_L*),

References:

- 1- J. Chatt, C. T. Kan, G. J. Leigh, C. J. Pickett and D. R. Stanley, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, **1980**, 2032.
- 2- B. P. Lever, *Inorg. Chem.*, **1990**, 29, 1271.

REDOX BEHAVIOUR OF ALKYNOL-DERIVED ALLENYLIDENE COMPLEXES OF IRON(II)

Ana Venâncio^a; Luísa Martins^{a, b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Portugaliae Electrochim. Acta*, vol. 19, pp. 361-366, 2001.

The cyclic voltammetric behaviour of the allenylidene complexes *trans*-[FeBr(L)(depe)₂][BF₄] (L = CCC(Me)Ph **1a**, CCCPh₂ **1b**, CCCEt₂ **1c**) is reported and the electrochemical *P_L* and *E_L* ligand parameters for the allenylidene ligands are estimated showing that they behave as slightly weaker *net* electron-donors than organonitriles.

COMBINED SPECTROSCOPIC STUDIES OF THIACARBOCYANINES: β -CYCLODEXTRIN SOLID INCLUSION COMPLEXES BY UV-VIS ABSORPTION, LASER INDUCED LUMINESCENCE, IR AND XPS

A.S. Oliveira^a; L.F. Vieira Ferreira^a; M.R. Vieira Ferreira^b; A.M. Ferraria^a; A. M. Botelho do Rego^a

^a CQFM, Complexo Interdisciplinar, IST, 1096 Lisboa Codex, Portugal

^b Secção de Química Orgânica, DEQ, ISEL, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do 6º Encontro Nacional de Fotoquímica da Sociedade Portuguesa de Química, pp.53-54, Campus do Monte da Caparica, Portugal, 11-12 Maio 2001.*

The interaction of cyanines with microcrystalline cellulose (MC) slows down the radiative deactivation processes that generally control cyanine's solution photophysics, increasing fluorescence quantum yields (Φ_F) and lifetimes. β -Cyclodextrin (β -CD) is chemically similar to cellulose but provides a better characterised environment in what concerns adsorption sites. Three differently substituted thiacyanines were included into β -CD and the solid complexes studied by complementary surface and bulk analysis techniques: diffuse reflectance (ground state diffuse reflectance absorption and laser induced luminescence), infrared spectroscopy and X-ray photoelectron (XPS). Φ_F of the solid complexes increases with the volume of the substituent; it shows a significant increase relatively to solution although smaller than in MC, where Φ_F decreases with the volume of the substituent. This is consistent with distinct aggregation behaviours of these probes on β -CD and MC. Laser induced fluorescence displayed a second emission at higher wavelengths relatively to the monomer emission.

EVIDÊNCIA DA FORMAÇÃO DE COQUE DURANTE A COMBUSTÃO CATALÍTICA DO TOLUENO SOBRE ZEÓLITO Y

A.P. Antunes^a, J.M. Silva^{a,b}, F.R. Ribeiro^a, M.F. Ribeiro^a, P. ;Magnoux^c, M. Guisnet^c

^a Centro de Engenharia Biológica e Química, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

^c UMR CNRS 6503, Université Poitiers, France

Publicado em: *Actas do 5º Encontro da Divisão de Catálise da Sociedade Portuguesa de Química, Leiria, 18 e 19 de Maio de 2001, pp. 43-44.*

A transformação do tolueno sobre catalisadores CuNaY ocorre através de duas reacções paralelas: a oxidação em CO₂ e H₂O, e a transformação em compostos pesados (coque) que ficam retidos na estrutura porosa dos zeólitos causando a sua desactivação. O incremento do teor em cobre conduz a um aumento da actividade para a oxidação do tolueno e facilita a remoção do coque formado durante a reacção. Da análise da composição do coque extraído conclui-se que a sua formação envolve um mecanismo bifuncional.

DIFFUSE REFLECTANCE STUDIES OF β -PHENYLPROPIOPHENONE AND BENZOPHENONE INCLUSION COMPLEXES WITH CALIX[4], [6] AND [8]ARENES

L.F. Vieira Ferreira^a, M.R. Vieira Ferreira^b, A. S. Oliveira^a, T.J.F. Branco^a, J.C. Moreira^c

^a Centro de Química-Física Molecular, Complexo Interdisciplinar, Instituto Superior Técnico, 1096 Lisboa Codex, Portugal

^b Secção de Química Orgânica, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

^c Centro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, Fundação Oswaldo Cruz, Rua Leopoldo Bulhões 1480, 21041-210, Brasil

Publicado em: *Book of Abstracts of the Frank Wilkinson Symposium, Loughborough University, United Kingdom, 22-23 June 2001.*

Calixarenes have received much less attention from photochemists when compared with other host molecules of practical importance. We have used β -phenylpropiophenone (β -PP) as a probe for inclusion in restricted geometries. β -PP and benzophenone (BZP) are useful for studies of molecular mobility and cavity dimension of different hosts. Here we used diffuse reflectance (DR) techniques (ground state DR absorption, DR laser flash-photolysis transient absorption and laser induced luminescence) and infrared absorption spectroscopy for the study of β -PP and BZP within p-tert-butylcalix[4], [6] and [8] arenes. The phosphorescence lifetime τ_F of the guest increases with the decrease of the ring aperture. BZP $n \rightarrow \pi^*$ absorption band evidences hypsochromic

shifts and band broadening with the increase of the host ring. τ_F of BZP decreases with the increase of the ring. β -PP exhibits strong room temperature phosphorescence in contrast with its solution behaviour; this proves its inclusion within the calix molecules. Clear evidence was obtained for inclusion in all cases.

DI- AND MONO-NUCLEAR Fe(II) COMPLEXES WITH DIISOCYANIDES

Ana Venâncio^a; Ji-Quan Wang^a, Luísa Martins^{a,b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Livro de Abstracts do 6th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry, pp. 340, Barcelona, Espanha, Julho 2001.*

Within our interest on the activation of small unsaturated molecules such as isocyanides, nitriles and related species, we have previously synthesized series of mononuclear isocyanide complexes with various transition metals, in particular with metal binding centres of the type $\{M(dppe)_2\}^{n+}$ ($dppe = Ph_2PCH_2CH_2PPh_2$), and now we report an extension of this study to diisocyanides which can act as bridges for dinuclear complexes.

The mononuclear complexes *trans*-[FeH(CN-X-NC)(dppe)₂][BF₄] (X = C₆H₄ or C₆H₄OC₆H₄), and the corresponding dinuclear ones with a diisocyanide bridge [$\{FeH(dppe)_2\}_2(\mu-(CN-X-NC))][BF_4]_2$ were prepared, and their synthesis, spectroscopic properties and cyclic voltammetry are presented and discussed, namely in terms of the electronic properties of the diisocyanide ligands and the potential metal-metal interaction in the dinuclear complexes.

TOTAL OXIDATION OF VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS – CATALYTIC OXIDATION OF TOLUENE OVER CuY ZEOLITES

A.P. Antunes^a, J.M. Silva^{a,b}, M.F. Ribeiro^a, F.R. Ribeiro^a, P. Magnoux^c, M. Guisnet^c

^a Centro de Engenharia Biológica e Química, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

^c UMR CNRS 6503, Université Poitiers, France

Publicado em: *Proceedings of 13th International Zeolite Conference, Montpellier, France, Julho 2001. Studies in Surface Science and Catalysis, Vol. 135, "Zeolites and Mesoporous Materials at the Dawn of the 21st Century", edited by A. Galarneau, F. Di Renzo, F. Fajula and J. Vedrine, p.325 and CDROM, Elsevier, 2001.*

Transformation of toluene in low concentration (800 ppm) in air over CuY zeolites containing different copper contents and Si/Al ratios was studied at temperatures between 150 and 500°C. It was found that total oxidation is promoted on non dealuminated catalysts and depends on the copper content. The most active catalysts correspond to the catalysts with Cu contents that are close to the complete exchange of the zeolite. The presence of sodium cocations in CuY zeolites increases their combustion efficiency, by improving the dispersion of ionic copper species and preventing the formation of CuO clusters.

BASIC Cs-MODIFIED Pt/MCM-41: ACTIVITY IN n-HEXANE CONVERSION

J. Blanchard^a, M. Breyse^a, K. Fajerwerg^a, P. Massiani^a, M.F. Ribeiro^b, J.M. Silva^{bc}

^a Laboratoire de Réactivité Surface, UMR-CNRS 7609, Université Pierre e Marie Curie, France

^b Centro de Engenharia Biológica e Química, IST, UTL

^c Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Proceedings of 13th International Zeolite Conference – Recent Research Reports, p. 26-R-05, Montpellier, France, 8-13 July 2001.*

The influence of Cs (2 wt%) in Pt/MCM-41 catalysts on their behavior in n-hexane conversion has been investigated. Whatever the Pt content (1 or 2 wt% Pt), Cs induces an increase of both the initial activity and aromatisation behavior. On the basic Cs-containing Pt-richest MCM-41 sample, the selectivity to benzene reaches values close to those obtained on Pt/Csβ zeolite. However, the catalytic stability is lower for the Cs-containing mesoporous systems. The catalytic results will be discussed in view of chemical, TPR, nitrogen physisorption, XRD and TEM data.

STABILIZATION OF Pt NANOPARTICULES IN BASIC Pt/Csb : A XAS STUDY

P. Massiani^a, F. Villain^b, M.F. Ribeiro^c, J.M. Silva^{c,d}, M. Tabi^a

^a Laboratoire de Réactivité Surface, UMR-CNRS 7609, Université Pierre e Marie Curie, France

^b LCIM2, Université Pierre e Marie Curie, France

^c Centro de Engenharia Biológica e Química, IST, UTL

^d Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Proceedings of 13th International Zeolite Conference – Recent Research Reports, p. 28-R-02, Montpellier, France, 8-13 July 2001.*

Two Pt containing Cs β zeolites with (Cs/Al=1.3) or without (Cs/Al=0.9) excess Cs were prepared and characterized by XAS after calcinations, then reduction. Both XANES and EXAFS analyses show that excess Cs i) increases the oxidation state of Pt after calcinations and ii) provokes the formation upon reduction of Pt nanoparticles as small as those of the industrial PtKL catalyst. The high Pt dispersion is explained in terms of Pt species being stabilized by dispersed CsO₂ clusters.

DENSITY OF FLUIDS AND THEIR BINARY MIXTURES AT HIGH TEMPERATURES

M.F.B. Mourato^a, J.A.P. Coelho^{a,b}, A.M.F. Palavra^a

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Proceedings of the 7th European Days on Contemporary Thermodynamics, pp. 191-196, Mons, Belgica, Agosto 2001.*

In Chemical Engineering there is an urgent need for the knowledge of the density of pure fluids and their binary mixtures, over a broad range of temperatures (1,2). Many studies have been performed at low and room temperatures(3,4). However, the situation, is rather different at high temperatures. To fill this gap, an experimental program on the equation of state of pure fluids of energetic importance at high temperature was started, in Thermophysics Division of NIST-NBS (Boulder, USA), by Straty et al (5,6,7). The isochoric method was chosen to measure the density, because is particularly suitable for automation. The same method was used for density measurements of binary mixtures at high temperatures by Wakeham et al (8,9,10) at the National Engineering Laboratory (Glasgow, U.K.), by Kobagashi et al (11) at the Department

of Chemical Engineering, Rice University (Houston, USA) and by Palavra et al (12) at Laboratório de Termodinâmica Experimental, I.S.T. (Lisbon, Portugal). In this work we present some interesting isochoric studies at high temperatures. Moreover, the thermal degradation of compounds at high temperatures, which affects the accuracy of the density measurements, is discussed.

SOLUBILITY OF 1-BUTENE IN WATER AND IN A MEDIUM FOR THE CULTIVATION OF A BACTERIAL STRAIN

Maria Celeste C. Serra^{a,b}, A.M.F. Palavra^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa

^bCentro de Química Estrutural, IST, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa

Publicado em: *Proceedings of the 7th European Days on Contemporary Thermodynamics, JETC7, pp. 268-270, Mons, Bélgica, Agosto 2001.*

Solubility measurements of 1-butene in water, in the temperature range from 293.15 to 323.15K and at atmospheric pressure, were carried out using a Ben-Naim/Baer type apparatus. Using accurate thermodynamic relations, the Ostwald coefficients at the experimental conditions and at infinite dilution, the mole fractions of the dissolved gas at the gas partial pressure of 101.325 kPa and the Henry coefficients at the water vapour pressure were calculated. The values of the mole fraction were fitted to the Clarke-Glew-Weiss equation and thermodynamic quantities for the process of transferring the 1-butene molecules from the gaseous to the water phase were computed. Moreover, the experimental Henry coefficients for 1-butene in water were compared with those estimated by the Scaled Particle Theory showing a reasonable agreement, with a mean deviation of about 8%. Solubility measurements of 1-butene in an aqueous medium for the cultivation of *Xanthobacter* Py2 in the same temperature range were also performed. These data are approximately 2.6% lower than those observed in pure water.

COMBUSTÃO CATALÍTICA DO TOLUENO. INFLUÊNCIA DO CO-CATIÃO NO COMPORTAMENTO OXIDANTE DE CATALISADORES ZEOLÍTICOS DO TIPO CuY

A.P. Antunes^a, J.M. Silva^{a,b}, F.R. Ribeiro^a, M.F. Ribeiro^a

^a Centro de Engenharia Biológica e Química, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Proceedings of 8th International Chemical Engineering Conference – CHEMPOR’2001, pp. 275-282, Aveiro, Portugal, 12-14 September 2001.*

Neste trabalho estuda-se a influência da presença de co-catiões de Na, Cs e Ba na combustão catalítica do tolueno em catalisadores CuY. Observa-se que a presença de co-catiões de Cs e Ba, mesmo em pequenas quantidades contribuem para melhorar o desempenho deste tipo de catalisadores. No caso do co-catião de Cs reduziu-se a temperatura de “light-off” em cerca de 50°C relativamente ao catalisador sem o co-catião.

O DESAFIO DO MILÉNIO

L. Santos Medeiros, B. Santos Baptista

Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Proceedings of 8th International Chemical Engineering Conference – CHEMPOR’2001, pp. 133-136, Aveiro, Portugal, 12-14 September 2001.*

A Educação deve “construir” o Engenheiro Químico, com vista a torná-lo um ser social e empreendedor, determinado a contribuir para o avanço e bem estar da Humanidade. A Educação deve transmitir-lhe também um código ético de actuação, para que o princípio da conservação de energia se mantenha válido, mas não destrutivo. Sendo a Educação um processo dinâmico, as acções a empreender exigem uma metodologia que compreenda a sua contextualização, visualização de oportunidades, definição de objectivos, estratégias de sucesso e comparação de resultados com vista a reiniciar o processo. Em suma, observação, experimentação e conclusão. Em linguagem actual, os designados processos de “Benchmarking” e “Reengenharia”.

A QUÍMICA INORGÂNICA NA EDUCAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Martins, Luísa R.; Dias, M. Cândida Monteiro; Almeida, Sílvia R.; Matias, M. Lourdes C.; Pontinha, A. J.; Bastos, Elisabete C.; Pacheco, Vanda; Cardoso, Magda.

Secção de Química Inorgânica, Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *CHEMPOR'2001, 8th International Chemical Engineering Conference, pp. 123-124, Aveiro, Portugal, Setembro 2001.*

“Para ser engenheiro é preciso ter engenho...”

A educação em engenharia visa ministrar a arte de saber fazer (ter engenho), desenvolve-se nas Escolas Superiores de Engenharia, em domínios fundamentais para a vida em sociedade do cidadão comum. Requer empenho por parte de todos os protagonistas do processo, educadores e educandos, não só a nível das disciplinas de Engenharia, complementares ou da especialidade, como também das de formação básica.. Disciplinas como a Química Inorgânica poderão, de facto, ser pedra angular da formação do Engenheiro Químico e contributo fundamental na sua área de intervenção, desde os processos químicos industriais até à Investigação Aplicada. A importância da Química Inorgânica na educação em Engenharia Química é posta em evidência sob a forma de “flow-sheet” que mostra todo o percurso pedagógico, didáctico e científico que será necessário cumprir para que a partir dos meios disponíveis, humanos, materiais e de infra-estruturas, se alcance o produto final: a educação em Engenharia Química.

TRANSFORMAÇÃO DO 1-BUTENO SOBRE ARGILAS COM PILARES

A. Martins^a; A.P. Carvalho^b; J.M. Silva^a; J. Pires^b; M.H. Vasques^a; M.B. Carvalho^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FC, UL

Publicado em: *Actas da 8.th International Chemical Engineering Conference – CHEMPOR'2001, vol. 1, pp. 307-314, Aveiro, Portugal, Setembro 2001.*

Estudou-se a transformação do 1-buteno a diferentes temperaturas sobre argilas com pilares - PILCs - de alumínio e zircónio. Como material de comparação usou-se um zeólito do tipo Y.

As PILCs foram preparadas a partir de argilas provenientes de Benavila (Alentejo) ou comerciais (Iaponite, da Laporte Ind.), e designadas, respectivamente, por BEN e LAP. Após intercalação com pilares de óxido de Al e Zr obtiveram-se os materiais Al-BEN, Al-LAP e Zr-BEN. O zeólito estudado foi o NaHY, com aproximadamente 75% de teor de troca protónica.

A transformação do 1-buteno a 130; 200 e 300 °C, foi efectuada em reactor de leito fixo, a $p = 1$ atm e débito constante de reagente de 20 mL/min (5% de 1-buteno em azoto). Os efluentes foram analisados por cromatografia gasosa, usando uma coluna capilar tipo PLOT- Al_2O_3/KCl com 50m e um detector de ionização de chama. Os resultados obtidos mostram que as argilas com pilares apresentam uma actividade catalítica idêntica à da amostra de zeólito, com excepção da Al-LAP que apresenta uma actividade mais reduzida.

A distribuição de produtos às três temperaturas testadas apresenta um padrão comum: maior percentagem de produtos de oligomerização no início da reacção (5 min) e produtos de isomerização linear após 15 minutos de reacção. A amostra Al-LAP mostra um comportamento atípico que pode justificar-se pela sua elevada mesoporosidade. Os valores da razão cis/trans 2-buteno revelaram que os materiais estudados possuem propriedades ácidas, particularmente Zr-BEN e NaHY que apresentam valores coincidentes. Sobre as amostras frescas e desactivadas efectuou-se um estudo de adsorção de piridina seguida por espectroscopia de infravermelho. A análise dos resultados permitiu concluir que, em todas as amostras, os centros ácidos de Lewis desempenham um papel activo na transformação do 1-buteno.

ESPECIFICIDADES DO ENSINO PÓS-LABORAL DA ENGENHARIA QUÍMICA

Manuel Matos^{a,b}, Helena Avelino^a, Manuela Gonçalves^{a,b}, Constantino Soares^a

^a Conselho Pedagógico do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (Biénio 2000/2001)

^b Comissão de Auto-Avaliação do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Proceedings of CHEMPOR 2001, 8th International Chemical Engineering Conference, Aveiro, Portugal, 12-14 September 2001*

Acentua-se sobre algumas instituições do Ensino Superior pressões da sociedade para a implementação de cursos superiores em regime pós-laboral. Também os cursos de formação ao longo da vida activa recairão preferencialmente em regime pós-laboral. O Instituto Superior de Engenharia de Lisboa sempre privilegiou este regime de formação por entender ser uma tarefa nobre a formação de profissionais já inseridos na vida activa. Pensamos que esta experiência acumulada pode ser partilhada com a restante comunidade educativa e empresarial, expondo aos primeiros as especificidades de implementação destes cursos e alertando os segundos para a importância da formação contínua. Numa primeira fase caracterizam-se os alunos que frequentam o curso de Engenharia Química do ISEL inquiridos através de inquérito anónimo no acto de inscrição do ano lectivo de 2000/2001. Separaram-se estes atendendo ao regime de frequência (diurno ou pós-laboral) e analisaram-se os dois grupos quanto às suas especificidades: pessoais, frequência e aproveitamento. Como consequências desta análise apontam-se algumas directrizes que devem ser tidas em conta no desenho curricular dos cursos em regime pós-laboral.

METODOLOGIA PARA A SÍNTESE E PLANEAMENTO DA OPERAÇÃO DE SISTEMAS DE UTILIDADES NUM COMPLEXO INDUSTRIAL COM INTEGRAÇÃO ENERGÉTICA

A. Oliveira Francisco^a; H. Matos^b

^a Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Eng. Química

^b Instituto Superior Técnico, Departamento de Eng. Química

Publicado em: *8th International Chemical Engineering Conference – CHEMPOR'2001, Vol. 2, pp. 899-906, Aveiro, Portugal, Setembro 2001.*

As necessidades energéticas dos processos industriais, nomeadamente, potência mecânica, eléctrica e vapor de água são satisfeitas pelos sistemas de produção de utilidades. A síntese e projecto de sistemas de utilidades é apresentada na literatura, mas não foi ainda descrita uma metodologia completa para incorporar o conjunto de ferramentas de simulação e cálculo disponíveis. Neste trabalho descreve-se uma metodologia útil para projecto preliminar que compreende a simulação do processo com o Aspen PlusTM, integração energética de correntes do processo com o SuperTargetTM e a síntese, projecto e planeamento da

operação multiperíodo do sistema de utilidades através de um modelo de Programação Linear Inteira Mista (“MILP”) utilizando o GAMS™. As várias etapas desta metodologia são ilustradas através de um exemplo que consiste em considerar a existência de um complexo industrial cujas necessidades de utilidades são conhecidas e ao qual se pretende adicionar uma nova unidade processual.

STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF THE TERTIARY MIXTURE METHANOL-ACETONITRILE-1-PROPANOL

Ruben Elvas Leitão^a; Filomena Martins^b; M. Cristina Ventura^b; Néilson Nunes^a

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FC, UL

Publicado em: *Livro de Resumos do 8.º Simpósio Europeu sobre Reactividade Orgânica, Cavtat, Croácia, Setembro 2001.*

The study of solute-solvent-solvent interactions in mixed solvents has become increasingly important in the last few years due to the innumerable applications of this type of media in different processes. Although properties of binary mixtures have been extensively studied, very little work has been collected for ternary systems. However, these systems have a considerable interest in fields such as analytical chemistry, industrial processes and in the simulation design of biological environments. The present study aims at the structural characterization of the ternary mixture methanol/acetonitrile/1-propanol (MeOH/AcCN/1-PrOH), as a starting point to further reactivity and mechanistic studies. For this purpose we have determined the Dimroth and Reichardt parameter, *ETN*, and the refractive index, *n_D*, for 13 different compositions of the ternary system and for 10 different compositions of each of the 3 binary mixtures, at 25.0 and 50.0 °C. The chemicals employed were supplied by Sigma-Aldrich (HPLC grade) and precautions were taken to avoid evaporation and contamination by humidity. We have applied the Bosch *et al.* preferential solvation model to the *ETN* data for the various binary mixtures. We have also calculated the excess quantities for the same mixtures. A variable-degree polynomial suggested by Redlich and Kister was used to correlate both excess properties for the binary mixture data. With the information thus

collected, we have drawn some conclusions on the structure of the ternary system.

KINETIC AND MECHANISTIC STUDIES OF THE REACTIONS OF 3-BROMO-3-METHYLPENTANE AND 3-BROMO-3-ETHYLPENTANE IN PROTIC AND APROTIC SOLVENTS

Filomena Martins^a; Ruben Elvas Leitão^b; Luís Moreira^a; Luísa Moita^a

^aDepartamento de Química e Bioquímica, FC, UL

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Livro de Resumos do 8.º Simpósio Europeu sobre Reactividade Orgânica, Cavtat, Croácia, Setembro 2001.*

The solvolytic reactions of tertiary alkyl halides are among the most studied organic reactions in terms of mechanistic characterization. The information thereafter obtained has enabled significant improvement in our understanding of solute-solvent-solvent interactions in solution. The application of different methods of multivariate data analysis has allowed the identification and quantification of solvent descriptors for this type of processes. However, these analyses have pointed out the need to enlarge the set of solutes and solvents so that more reliable interpretations can be drawn. In this context, and in the sequence of former work, we have studied the solvolytic reactions of two synthesized solutes, 3-bromo-3-methylpentane and 3-bromo-3-ethylpentane, in a number of protic and aprotic solvents, at 25.00 °C. The conductimetric technique has been used and the reactions were followed to 90-95% of the apparent plateau. Rate coefficients were calculated using the Swinbourne time-lag method optimized by the use of a computer program specifically written for this purpose.

ALKYNOL-DERIVED ALLENYLIDENE COMPLEXES OF IRON(II)

Ana Venâncio^a; Luísa Martins^{a, b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Livro de Abstracts da 3rd International School of Organometallic Chemistry, pp. 135, Camerino, Itália, Setembro 2001.*

The dehydration of propargyl alcohols by transition metal centres provides a general method for the synthesis of compounds containing multiple metal-carbon bonds and, in particular, of allenylidene complexes, with the $M=C=C=CR^1R^2$ group. The interest of these compounds can arise, for instance, from their material properties and their potential capacity to behave as building blocks for the synthesis of unsaturated organic molecules and for the access to metal-containing copolymers.

The allenylidene complexes $trans-[Fe(Br)(=C=C=CR^1R^2)(depe)_2][Y]$ (R^1, R^2 = alkyl or aryl; $depe=Et_2PCH_2CH_2PEt_2$; $Y = BF_4$ or BPh_4) have been synthesized by reaction of $trans-[FeBr_2(depe)_2]$ with the appropriate alkynol, $HC\equiv C(OH)R^1R^2$, and their synthesis, spectroscopic, electrochemical and FAB-MS properties are reported. Of particular significance towards the understanding of the electron donor/acceptor properties of the allenylidene ligands is the cyclic voltammetric study of these complexes which has allowed to estimate their electrochemical P_L and E_L ligand parameters and thus compare them with related species.

SUPERCRITICAL CO₂ EXTRACTION OF β -CAROTENE FROM ALGAE

R.L. Mendes^a, B.P. Nobre^a, A.P. Pereira^b, M.U. Diego^b, J.P. Coelho^c, A.M.F. Palavra^b

^a Departamento de Energias Renováveis, INETI, Lisboa, Portugal

^b Departamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^c Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa Portugal

Publicado em: *Proceedings of the 6th Conference on Supercritical Fluids and their Applications, pp.187-192, Maiori-Salerno, Italy, September 2001.*

Supercritical CO₂ extraction of β -carotene and other lipids, from freeze-dried samples of 27 g of *Dunaliella salina*, was carried out at pressures of 200 and 300 bar and temperature of 40 °C, at flow rates of gas of 5.5 and 9.6 L (STP)/min, in a flow apparatus. The yield of the extracted lipids increased with the pressure but not in the case of β -carotene. When β -carotene extraction yield was plotted against the CO₂ mass, the curves overlapped at 300 bar, for the two flow rates, until about 35% of the total

amount of β -carotene was extracted. Beyond this point, the yield increased faster for the lower flow rate, being possible a more efficient extraction of the compound. The lipid extraction showed a similar behavior. Moreover, it was obtained a cis/trans ratio of the β -carotene isomers about three times that existing in the alga.

SUPERCRITICAL CO₂ EXTRACTION OF β -CAROTENE FROM ALGAE

R.L. Mendes^a, B.P. Nobre^a, A.P. Pereira^b, M.U. Diego^b, J.P. Coelho^c, A.M.F. Palavra^b

^a Departamento de Energias Renováveis, INETI, Lisboa, Portugal

^b Departamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^c Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa Portugal

Publicado em: *Proceedings of the 6th Conference on Supercritical Fluids and their Applications*, pp.187-192, Maiori-Salerno, Italy, September 2001.

Supercritical CO₂ extraction of β -carotene and other lipids, from freeze-dried samples of 27 g of *Dunaliella salina*, was carried out at pressures of 200 and 300 bar and temperature of 40 °C, at flow rates of gas of 5.5 and 9.6 L (STP)/min, in a flow apparatus. The yield of the extracted lipids increased with the pressure but not in the case of β -carotene. When β -carotene extraction yield was plotted against the CO₂ mass, the curves overlapped at 300 bar, for the two flow rates, until about 35% of the total amount of β -carotene was extracted. Beyond this point, the yield increased faster for the lower flow rate, being possible a more efficient extraction of the compound. The lipid extraction showed a similar behavior. Moreover, it was obtained a cis/trans ratio of the β -carotene isomers about three times that existing in the alga.

SUPERCRITICAL CO₂ EXTRACTION OF β -CAROTENE FROM ALGAE

R.L. Mendes^a, B.P. Nobre^a, A.P. Pereira^b, M.U. Diego^b, J.P. Coelho^c, A.M.F. Palavra^b

^a Departamento de Energias Renováveis, INETI, Lisboa, Portugal

^b Departamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^c Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Proceedings of the 6th Conference on Supercritical Fluids and their Applications, pp.187-192, Maiori-Salerno, Italy, September 2001.*

Supercritical CO₂ extraction of β -carotene and other lipids, from freeze-dried samples of 27 g of *Dunaliella salina*, was carried out at pressures of 200 and 300 bar and temperature of 40 °C, at flow rates of gas of 5.5 and 9.6 L (STP)/min, in a flow apparatus. The yield of the extracted lipids increased with the pressure but not in the case of β -carotene. When β -carotene extraction yield was plotted against the CO₂ mass, the curves overlapped at 300 bar, for the two flow rates, until about 35% of the total amount of β -carotene was extracted. Beyond this point, the yield increased faster for the lower flow rate, being possible a more efficient extraction of the compound. The lipid extraction showed a similar behavior. Moreover, it was obtained a cis/trans ratio of the β -carotene isomers about three times that existing in the alga.

FLUORESCENT PROPERTIES AND SINGLET OXYGEN GENERATION BY A SERIES OF NEW UNSYMMETRICALLY SUBSTITUTED MESO-PORFIRINIC COMPOUNDS

Dumitru Licsandru^a; Rica Boscencu^b; Cristina Mandravel^a; Veronica Nacea^b; Luis Filipe Vieira Ferreira^c; Anabela Sousa Oliveira^c; Margarida Vieira Ferreira^d

^a Physical Chemistry Dpt., Faculty of Chemistry, University of Bucharest, Bulevardul Carol I, Sector 1, Bucharest, Romania

^b Inorganic Chemistry Dpt., Faculty of Pharmacology, "Carol Davila" University of Medicine and Pharmacology, str. Traian Vuia, nr.6, Sector 1, Bucharest, Romania

^c Centre of Molecular Physical Chemistry, Superior Technical Institute, Technical University of Lisbon, Av. Rovisco Pais, 1096 Lisbon, Portugal

^d Organic Chemistry Division, Chemical Engineering Dpt., Superior Engineering Institute of Lisbon, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisbon, Portugal

Publicado em: *Book of Abstracts of the Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering (RICCCE 12), Bucharest, Romania, 13-15 September 2001.*

This paper is dealing with the research of fluorescent properties of a series of new unsymmetrically substituted meso-porphyrins as follows: 5-(2-hydroxyphenyl)-10,15,20-tris-phenyl-21,23-H-porphine (TPPOHO), 5-(3-hydroxyphenyl)-10,15,20-tris-phenyl-21,23-H-porphine (TPPOHM),

5-(4-hydroxyphenyl)-10,15,20-tris-phenyl-21,23-H-porphine (TPPOHP),
5-(2-hydroxyphenyl)-10,15,20-tris-butyl-21,23-H-porphine (TBPOHO).

The fluorescence yield, Φ_F , singlet lifetime, τ_S , and first order rate of quenching of singlet, k_S , are reported.

The spectral investigation of singlet oxygen species generated by new compounds and singlet oxygen quantum yield, Φ_{Δ} , are also presented.

SOLUBILIDADE DE GASES EM LÍQUIDOS

M. Celeste C. Serra^{a,b}; Sílvia Carvalho^b; A. M. F. Palavra^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa

^bCentro de Química Estrutural, IST, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa

Publicado em: *Livro de Resumos do 5º Encontro Nacional de Química Física*, pp. 0-02 Faro, Portugal, Setembro 2001.

O facto dos gases serem pouco solúveis na maior parte dos líquidos tem possibilitado a aplicação dos resultados das medidas de solubilidade na avaliação de teorias sobre o estado líquido. Por outro lado, o conhecimento da solubilidade de gases em líquidos pode contribuir para o desenvolvimento e a optimização de processos químicos, ambientais e biotecnológicos. No Laboratório de Termodinâmica Experimental do Instituto Superior Técnico foi construído um aparelho do tipo Ben-Naim/Baer, o qual permite a realização de medidas de solubilidade à pressão atmosférica e no intervalo de temperatura entre 293,15 e 333,15K, com uma precisão de $\pm 0,3\%$. Neste trabalho foram efectuados testes ao funcionamento do aparelho com o sistema etileno-água e realizadas medidas de solubilidade de 1,3 butadieno em água. Os valores das fracções molares e dos coeficientes de Henry dos referidos gases em água foram determinados a partir de um processo iterativo de cálculo.

ANÁLISE DE SÓDIO E POTÁSSIO EM BEBIDAS

M. Celeste C. Serra; M. Isabel Godinho

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1949-014 Lisboa

Publicado em: *Livro de Resumos do 3º Encontro Nacional de Química Analítica*, pp. 37, Lisboa, Portugal, Novembro 2001.

O conhecimento da composição química dos alimentos desempenha um papel relevante por contribuir para a avaliação da sua qualidade e para a compreensão das diferentes transformações que possam vir a sofrer. Particularmente importante é a determinação da composição mineral dos alimentos. Os elementos metálicos presentes nos alimentos além de contribuírem para o seu valor nutritivo, permitem a activação e a inibição de enzimas e influem na sua textura e sabor. Além disso, a determinação da composição mineral poderá evidenciar a existência de elementos metálicos resultantes do processo de fabrico e armazenamento, os quais podem não só interferir na sua qualidade mas também constituir um risco para a saúde. Como ponto de partida para futuros estudos foram realizadas análises de sódio e potássio em sumos de fruta, leite e vinho, por fotometria de chama. Os resultados evidenciaram uma boa concordância com os existentes na literatura e permitiram comparar o teor destes elementos em sumos naturais e comerciais.

AUTOMATIZAÇÃO DE PROCEDIMENTOS DE ANÁLISE NO ENSINO DA ANÁLISE QUÍMICA

Vitor J. M. Borges, Rui M. G. Filipe, Manuel J. Matos

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1949-014 Lisboa

Publicado em: *Livro de Resumos da 3ª Conferência Nacional de Química Analítica - Analítica 2001, Lisboa, Portugal, Novembro de 2001*

É do conhecimento geral que os equipamentos de análise são, cada vez mais, totalmente automatizados. Esta automatização inclui geralmente o processo de análise, mas acima de tudo a aquisição, processamento e tratamento de resultados. Torna-se assim essencial que os alunos tomem contacto com as técnicas de análise automatizadas durante a sua formação.

No laboratório de Análise Instrumental do DEQ- ISEL, são ensinados procedimentos de análise química essencialmente baseados em métodos instrumentais de análise. A maioria dos equipamentos de análise usados possuem portas de comunicação digitais, as quais ligadas a computadores pessoais, e utilizado software por nós desenvolvido, constituem sistemas automatizados cujo principal objectivo é:

- aprendizagem no campo da conexão entre aparelhagem científica e computadores pessoais;
- possibilitar a concepção de software simples e de fácil operação, que pode mesmo ser elaborado pelos alunos.

Estes objectivos podem ser conseguidos através do desenvolvimento de programas, em linguagens de programação simples e acessíveis, como o Quick Basic da Microsoft, que permitem a recolha dos dados, a utilização de rotinas de análise estatística dos resultados, bem como o seu armazenamento para futura utilização ou consulta. A opção por esta linguagem, em ambiente MS-DOS, possibilita a reutilização de computadores já obsoletos para os padrões actuais.

Um dos exemplos, já em aplicação no laboratório, é o da análise potenciométrica por eléctrodos selectivos, utilizando um potenciómetro com porta de comunicação RS232 e um PC 286 a 33 MHz que foi por nós totalmente automatizada. Os alunos passaram assim a dispor de um equipamento de análise modernizado a custos reduzidos.

AS BOAS PRÁTICAS DE LABORATÓRIO NO ENSINO DA ANÁLISE QUÍMICA

Manuel J. Matos

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1949-014 Lisboa

Publicado em: *Livro de Resumos da 3ª Conferência Nacional de Química Analítica - Analítica 2001, Lisboa, Portugal, Novembro de 2001*

A necessidade de harmonização de procedimentos laboratoriais de análise foi particularmente sentida nos EUA em finais dos anos sessenta quando foram apresentados à FDA (Food and Drug Administration) resultados de testes laboratoriais completamente opostos para um mesmo produto. Este tipo de situações levou à implementação em 1976 nos Estados Unidos das primeiras Normas de Boas Práticas Laboratoriais (GLP). Posteriormente, normas baseadas nas GLP's americanas foram adoptadas pelos países da OCDE num esforço de harmonização global dos procedimentos laboratoriais e industriais.

Torna-se assim importante que os futuros Engenheiros da Indústria Química possuam uma formação que lhes permita reforçar, ou mesmo implementar, as GLP's nos laboratórios de análise química.

Na óptica do funcionamento dos laboratórios de ensino de análise química, as GLP's são geralmente difíceis de implementar devidos ao modelo intrínseco de funcionamento (partilha de um laboratório por várias turmas, execução de procedimentos diferenciados, etc). Também a nossa prática de investigadores nos leva, por vezes, a não conseguir satisfazer uma grande parte dos procedimentos preconizados pelas GLP's, transferindo esta praxis para as práticas educativas.

Propusemo-nos assim, implementar gradualmente as Boas Práticas de Laboratório no Laboratório de Análise Instrumental do Dep. de Engenharia Química do ISEL, um laboratório essencialmente vocacionado para o ensino da análise química. Observou-se uma mudança de postura na execução do trabalho laboratorial por parte dos alunos, que conduzem agora os seus trabalhos de um modo mais sistemático, mais ordenado e produtivo. Parece-nos que a adopção das Boas Práticas de Laboratório é essencial no ensino tornando-se os alunos detentores de uma formação sólida nesta área que propagarão no seu percurso profissional.

OPTIMIZAÇÃO DAS CONDIÇÕES EXPERIMENTAIS PARA ENSAIOS DE VOLTAMETRIA DE REDISSOLUÇÃO ANÓDICA NUMA CÉLULA CONVENCIONAL. EFEITOS DA AGITAÇÃO DA SOLUÇÃO.

Maria Irene S. Lopes^a, Nelson A. F. Silva^b, Manuel J. Matos^b, Ruben A. Elvas Leitão^b

^a Departamento de Química e Bioquímica, FCUL, Campo Grande, 1749-016 Lisboa

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1949-014 Lisboa

Publicado em: *3º Encontro Nacional da Divisão de Química Analítica da Sociedade Portuguesa de Química, 8 e 9 de Novembro, ISEL, Lisboa.*

A Voltametria de Redissolução Anódica de Onda Quadrada (SWASV) é, hoje, uma das mais eficientes técnicas para a determinação de quantidades vestigiais de metais pesados, nomeadamente os mais tóxicos. Em virtude da sua elevada sensibilidade, selectividade e rapidez, este método mostra-se extremamente adequado à análise de matrizes ambientais, industriais e clínicas.

Os avanços verificados neste campo da análise electroquímica conduziram ao desenvolvimento de células de concepção relativamente complexa, com vista a melhorar o rigor e a fiabilidade dos resultados

obtidos. Como exemplo temos a célula de fluxo Wall-Jet, o eléctrodo de disco rotativo, a análise por injeção em fluxo descontínuo (BIA), entre outras.

O presente trabalho pretende mostrar que a utilização de uma célula convencional, sob determinadas condições experimentais, é uma alternativa perfeitamente viável para a aplicação desta técnica.

Verifica-se que, com o recurso à agitação da solução no passo da pré-concentração do catião metálico, se consegue um melhoramento evidente dos resultados obtidos. Além de um pico de redissolução anódica bem definido (contrariamente à situação de ausência de agitação, onde, mesmo com um tempo de deposição de 240 s, não se regista qualquer pico), consegue-se a redução imediata do período de deposição, para metade, podendo este ser reduzido até 60 s, sem afectar a qualidade dos resultados.

Para a realização destes ensaios utilizou-se como eléctrodo de trabalho o eléctrodo de carbono vítreo, como referência o eléctrodo de Ag /AgCl e um fio de platina como eléctrodo auxiliar.

ESTUDO VOLTAMÉTRICO DE ÓXIDOS MISTOS DE COMPOSIÇÃO NOMINAL $\text{CoFe}_{2-x}\text{M}_x\text{O}_4$ (M = Ni ou Mn)

M. Isabel Godinho^a; M. Alice Catarino^a; M. I. da Silva Pereira^b

^a Departamento de Engenharia Química, ISEL, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1949-014 Lisboa

^b CCMM, Departamento de Química e Bioquímica, FCUL, Campo Grande, 1749-016 Lisboa

Publicado em: *Livro de Resumos do 3º Encontro Nacional de Química Analítica, P 17, Lisboa, Portugal, 8 e 9 Novembro 2001.*

Através de ensaios voltamétricos é possível obter informação relativa aos processos redox que ocorrem à superfície do óxido, bem como das características superficiais do próprio óxido.

Neste trabalho apresentam-se resultados obtidos com eléctrodos de óxidos do tipo espinela de composição nominal $\text{CoFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ ($x = 0,0; 0,1; 0,3$) e $\text{CoFe}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_4$ ($x = 0,0; 0,4; 1,2$) em solução de KOH 1 mol dm^{-3} à temperatura ambiente.

A partir dos voltamogramas foram estimados os valores da capacidade da interface óxido/solução electrolítica e da carga voltamétrica para os diferentes eléctrodos preparados.

Estes resultados foram complementados com estudos morfológicos das superfícies dos eléctrodos por microscopia electrónica de varrimento (SEM).

Este estudo permitiu analisar a influência da presença do Ni e do Mn na composição destes óxidos.

ANÁLISE DE MATERIAIS LENHO-CELULÓSICOS POR PIRÓLISE ANALÍTICA (PY/GC-MS) E ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO (FT-IR)

António Velez Marques^a; José Carlos Rodrigues^b; Helena Pereira^b

^a Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

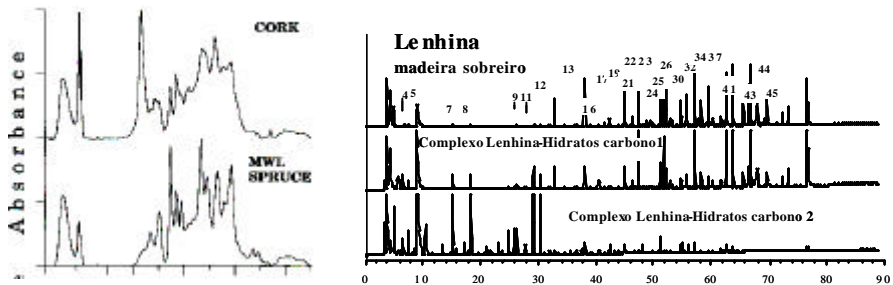
^b Instituto Superior de Agronomia

Publicado em *Livro de Resumos do 3º Encontro Nacional de Química Analítica, Lisboa, Portugal, 8 e 9 Novembro 2001.*

A natureza biológica complexa dos materiais lenho-celulósicos tem desafiado os investigadores no sentido da utilização de novas metodologias de análise de aplicação directa, não destrutivas, selectivas, sensíveis e adequadas para análise quantitativa¹ que permitam rápida e eficazmente a caracterização química e estrutural dos materiais. Apesar da sua diferente natureza e estrutura, as paredes celulares da madeira e da cortiça apresentam uma composição química em grande parte comum. Para além dos componentes extractáveis, a Madeira é composta pelas macromoléculas estruturais celulose, hemiceluloses e lenhina e a Cortiça, para além destes, apresenta suberina^{2,3}. A celulose é um homopolímero linear de β -D-glucose, as hemiceluloses são copolímeros não lineares de diferentes hidratos de carbono, a lenhina é um polifenólico amorfo constituído por unidades monoméricas fenilpropanólicas e a suberina é um poliéster tridimensional glicérido constituído por diferentes ácidos gordos e glicerol³. A pirólise analítica consiste na caracterização de materiais por reacções de degradação térmica na ausência de oxigénio. O principal objectivo da pirólise é a transformação de macromoléculas ou associações de macromoléculas complexas em produtos voláteis, os quais são posteriormente separados e identificados recorrendo a técnicas hifenadas de cromatografia gasosa espectroscopia de massa (Py/GC-MS). A maioria dos produtos de pirólise de materiais lenhocelulósicos estão identificados e podem encontrar-se em publicações da especialidade⁴. O

pirograma obtido (fig.2) constitui uma impressão digital do material permitindo a sua identificação e análise. A espectroscopia FT-IR permite obter espectros identificativos do material cujas intensidades relativas das bandas na zona de impressão digital permitem quantificar os diferentes componentes.

Fig.1: Espectros de FT-IR da cortiça e sua lenhina. Fig.2:Exemplo de pirogramas.



Referências

- 1- Rodrigues, José, D. Meier, O. Faix e H. Pereira. 1999. Determination of tree variation in Syringyl/Guaiacyl ratio of *Eucalyptus globulus* wood lignin by analytical pyrolysis. *Holzforschung* 48, 121-128.
- 2- Marques, A. V., D. Meier, O. Faix e H. Pereira. 1996. Isolation and Characterization of a Guaiacyl Lignin from saponified Cork of *Quercus suber* L. *Holzforschung* 50, 393-400.
- 3- Graça, José, H. Pereira. 2000. Diglycerols Alkenedioates in Suberin: building units of a poly(Acylglycerol) polyester. *Biomacromolecules* 1, 519-522.
- 4- Faix, O., D. Meier, I. Fortman and J. Bremer. 1991. Thermal degradation products of wood. Gaschromatographic separation and mass spectrometric characterization of monomeric carbohydrate derived products. *Holz Roh- Werkstoff* 49(5), 213-219.

AVALIAÇÃO DOS MÉTODOS PEDAGÓGICOS E DOS PROCESSOS DE AVALIAÇÃO DE CONHECIMENTOS PRATICADOS NO ISEL

Manuel J. Matos, Manuela Gonçalves, João Martins, Vasco Matos, Paulo Gambôa

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Av. Conselheiro Emídio Navarro, 1, 1949-014 Lisboa

Apresentada em: 1^{as} Jornadas Pedagógicas do ISEL, *Lisboa, Portugal, Novembro de 2001*

A avaliação e o acompanhamento das instituições de Ensino Superior Politécnico e Universitário são questões essenciais e intersectam-se profundamente com o desempenho científico, pedagógico e cultural das instituições.

No campo do desempenho pedagógico apresenta-se uma proposta integrada de Avaliação Pedagógica dos Docentes. Esta proposta é constituída por diversos instrumentos de avaliação e validação cujo principal objectivo, ao completarem-se, é fornecer indicadores claros e validados. Assim são definidos os seguintes aspectos:

- Docentes a avaliar
- Local da avaliação
- Período da avaliação
- Periodicidade da avaliação
- Levantamento da assiduidade dos alunos às aulas
- Lançamento e recolha dos inquéritos
- Leitura dos inquéritos
- Análise dos inquéritos
- Divulgação da análise dos inquéritos
- Apreciações finais

Com a presente proposta metodológica, pretende-se aferir a qualidade pedagógica do ensino praticado no ISEL. O objectivo primordial é a melhoria sustentada no tempo, através da continuidade das acções de avaliação pedagógicas e formação consideradas mais adequadas.

SELECTIVIDADE NA CICLIZAÇÃO INTRAMOLECULAR DE ARILALQUIL-DIAZENODICARBONILOS ASSIMÉTRICOS

Alexandra P. Costa,^a José V. Prata,^{a*} Ana M. Lobo,^b Sundaresan Prabhakar^b

^a Secção de Química Orgânica, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Instituto Politécnico de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro,1, 1949-014, Lisboa, Portugal. *E-mail: jvprata@deq.isel.pt

^b Secção de Química Orgânica Aplicada, Departamento de Engenharia Química, Centro de Química Fina e Biotecnologia e SINTOR-UNINOVA, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Quinta da Torre, 2829-516, Monte da Caparica, Portugal

Apresentada em: *XV Encontro Galego-Potugués de Química, Corunha, Espanha, 21 a 23 de Novembro 2001.*

A elevada regioselectividade observada na ciclização intramolecular de arilalquil-diazenodicarbonilos foi avaliada por FT-IR (CHCl₃, t.a.) e ¹H NMR (CDCl₃, t.a.).

Da avaliação espectral inferiu-se como local preferencial de coordenação do BF₃.Et₂O o oxigénio carbonílico amídico do diazeno resultante da

oxidação. A adição do ácido de Lewis a amostra autêntica de oxindol conduziu a idêntico padrão espectral.

A indução da ciclização em modo catalítico evidenciou resultados análogos.

Analisados os resultados obtidos foi possível postular a intervenção de um intermediário diazénio, gerado através do quelato de boro, como espécie chave do processo de ciclização.

DENSIDADES E ÍNDICES DE REFRAÇÃO DA MISTURA TERNÁRIA METANOL/ACETONITRIL/1-PROPANOL

Filomena Martins^a; Ruben Elvas Leitão^b; M. Cristina Ventura^c; Lúdia Pinheiro^d; Nélson Nunes^b

^aDepartamento de Química e Bioquímica, FC, UL

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

^cInstituto Superior de Educação e Ciência

^dFaculdade de Farmácia, UL

Publicado em: *Livro de Resumos do XV Encontro Galego – Português de Química*, pp. 311-312, Corunha, Espanha, Novembro 2001.

Os estudos estruturais e dinâmicos de solventes mistos têm conhecido desenvolvimentos significativos, em termos experimentais, do ponto de vista de modelos interpretativos (empíricos e teóricos) dos comportamentos observados e ainda pelas suas potenciais aplicações a campos como a química analítica, os processos industriais e o design de ambientes biológicos. A maioria dos estudos publicados referem-se a sistemas binários onde têm sido detectadas complexidades tais como fenómenos de solvatação preferencial e efeitos sinérgicos, entre outros. No entanto, as misturas ternárias, embora mais complexas, são potencialmente mais informativas, uma vez que a variabilidade de cada propriedade pode ser grandemente incrementada através de uma escolha de proporções adequadas dos componentes. Entre as propriedades que influenciam o comportamento físico-químico de solventes figuram a polaridade, a polarizabilidade, a acidez de Lewis e a dimensão das moléculas do solvente, as quais podem expressar-se em termos de descritores como o parâmetro *ET*, o índice de refração *n_D* e o volume molar *V_m*. Este trabalho prossegue a caracterização estrutural estática da mistura ternária Metanol / Acetonitrilo / 1-Propanol e das respectivas

misturas binárias, através da determinação de V_m e nD , a 25.0 °C, num conjunto de 22 composições da mistura ternária e 79 fracções molares das respectivas misturas binárias. A estes estudos seguir-se-ão outros de natureza cinética e termoquímica.

SOLUBILITY OF CAPSAICIN AND β -CAROTENE IN SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE AND IN HALOCARBONS

B.N. Hansen^a, A.H. Harvey^a, J.A.P. Coelho^b, A.M.F. Palavra^c and T.J. Bruno^a

^a Physical and Chemical Properties Division, NIST, Boulder, Colorado, USA

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa Portugal

^c Departamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Journal of Chemical Engineering Data*, 46, 1054-1059, 2001.

The solubilities of beta-carotene and capsaicin have been measured in supercritical carbon dioxide and in difluoromethane (R-32) and 1,1,1,2-tetrafluoroethane (R-134a) in the liquid phase at temperatures near and somewhat below their critical points. The solubility of β -carotene was also measured in 1,1,1-trifluoroethane (R-143a). The temperatures of the measurements ranged from 35°C to 55°C for capsaicin (up to 85°C in R-32) and from 40°C to 70°C for beta-carotene. The solubilities were determined using an HPLC system for capsaicin and a static high-pressure cell for β -carotene, and the amounts of products extracted were measured spectroscopically. At similar temperatures and densities, the solubility of capsaicin in the halocarbons was higher than that in carbon dioxide; there was not such a clear trend for β -carotene. Where the data covered a sufficient density range, they (along with literature data for the solutes in carbon dioxide) were analyzed with the semiempirical density-based model of Mendez-Santiago and Teja.

REDOX POTENTIAL - (ELECTRONIC) STRUCTURE RELATIONSHIPS IN 18- AND 17-ELECTRON MONONITRILE (OR MONOCARBONYL) DIPHOSPHINE COMPLEXES OF Re AND Fe

M. Fátima Silva^a; Luísa Martins^{a, b}; João Fraústo da Silva^a; Armando Pombeiro^a;

^a Centro de Química Estrutural, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

Publicado em: *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 66, 139-154, 2001.

The organonitrile or carbonyl complexes *cis*-[ReCl(NCR)(dppe)₂] (**1**; R = C₆H₄NEt₂-4 **1a**, C₆H₄OMe-4 **1b**, C₆H₄Me-4 **1c**, Ph **1d**, C₆H₄F-4 **1e**, C₆H₄Cl-4 **1f**, C₆H₄NO₂-4 **1g**, CH₂C₆H₄Cl-4 **1h**, Bu^t **1i**; dppe = Ph₂PCH₂CH₂PPh₂) or *cis*-[ReCl(CO)(dppe)₂] **2**, as well as *trans*-[FeBr(NCR)(depe)₂][BF₄] (**3**; R = C₆H₄OMe-4 **3a**, C₆H₄Me-4 **3b**, Ph **3c**, C₆H₄F-4 **3d**, C₆H₄NO₂-4 **3e**, Me **3f**, Et **3g**, CH₂C₆H₄OMe-4 **3h**; depe = Et₂PCH₂CH₂PEt₂), *trans*-[FeBr(CO)(depe)₂][BF₄] **4** (prepared for the first time in this work) or *trans*-[FeBr₂(depe)₂] **5** undergo, by cyclic voltammetry at a Pt-electrode and in aprotic non-aqueous medium, two successive single-electron reversible or partially reversible oxidations assigned to the Re^I → Re^{II} → Re^{III} or Fe^{II} → Fe^{III} → Fe^{IV} oxidations. The values of the oxidation potentials correlate with the Pickett's and Lever's electrochemical ligand and metal site parameters and have allowed to estimate such parameters for various nitrile ligands, depe and binding sites *i.e.* E_s and β for *cis*-{ReCl(dppe)₂}ⁿ (n = 0 or 1+) and *trans*-{FeBr(depe)₂}^m (m = 1+ or 2+), as well as S_M and I_M for *trans*-{FeBr(depe)₂}²⁺, the first Fe^{III/IV} couple to have such parameters estimated.

CATALYTIC OXIDATION OF TOLUENE OVER CuNaHY ZEOLITES. COKE FORMATION AND REMOVAL

A.P. Antunes^a, M.F. Ribeiro^a, J.M. Silva^{ab}, F.R. Ribeiro^a, P. Magnoux^c, M. Guisnet^c

^a Centro de Engenharia Biológica e Química, IST, UTL

^b Departamento de Engenharia Química, ISEL, IPL

^c UMR CNRS 6503, Université Poitiers, France

Publicado em: *Applied Catalysis B: Environmental*, 33 (2), 149-164, 2001.

Catalytic deep oxidation of toluene at low concentration in air, has been studied over CuNaHY zeolites with different copper contents. The reaction has been investigated in the course of time-on-stream, at temperatures between 150 and 500°C. The effect of copper content on the conversion of toluene into CO₂ and on the formation of carbonaceous

deposits (coke) retained inside the zeolite pores has been analyzed as a function of the reaction temperature. The analysis of the coke extracted from the catalysts showed that it is mainly composed of aromatic hydrocarbons and oxygenated aromatic compounds, the latter being predominant at low temperature and preferentially formed on the catalysts containing more copper. A bifunctional mechanism was proposed to explain the formation of coke over CuNaHY catalysts. Based on the differences of the nature of coke formed on NaHY and CuNaHY catalysts, and on a discussion about the coke formation and location, it was possible to conclude that copper sites are involved in both toluene and coke oxidation reactions. The increase of copper content from 1 to 8 wt.% promotes the oxidation of toluene and facilitates the removal of coke formed in the course of reaction.

PURIFICATION AND CHARACTERIZATION OF MONOCLONAL ANTIBODIES AGAINST α SUBUNIT OF HUMAN CHORIONIC GONADOTROPHIN HORMONE

Domingos, A.^a, Novo, C.^a, and Karmali, A.^b.

^a Departamento de Biotecnologia, Unidade de Tecnologia de Produção de Anticorpos monoclonais, INETI

^b Secção de Biotecnologia, Departamento de Engenharia Química do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Molecular Biotechnology*, 17, 119-128, 2001.

Monoclonal antibodies (Mabs) against human chorionic gonadotropin hormone (hCG) were raised by hybridoma technology using Sp2/0 myeloma cells as fusion partner. Sixty-five percent of the total culture wells exhibited hybrid growth and 8% of the total wells (13 culture wells) contained anti-hCG secreting hybrids. A positive hybrid cell line secreting antibodies against the free alpha-subunit of hCG was cloned twice by limiting dilution method and eighty four clones were obtained that secreted monoclonal antibodies anti-alpha hCG. One of these hybridoma clones (1C4) secreting monoclonal antibodies against the free alpha-subunit of hCG was selected for purification and characterization purposes. This hybridoma cell line secreted monoclonal antibodies of IgG1 subclass, which were purified by affinity chromatography on Protein A Sepharose CL-4B column with a final relative recovery of antibody activity of 75% and a purification factor of about 12. The

purified preparation was analyzed by SDS-PAGE, native PAGE, and IEF. Specificity studies of this Mab revealed that it recognized specifically an epitope on the free alpha-subunits of hCG, FSH, LH, and TSH as determined by enzyme immunoassays. On the other hand, this Mab exhibited crossreactivity with other pituitary hormones either as free subunits or intact molecules as follows: alpha hCG 100%; intact hCG 1.8%; beta hCG 0.14%; alpha FSH 24.5%; intact FSH 0.8%; beta FSH 0.09%; alpha LH 20.5%; intact LH 0.9%; beta LH 0.08%; alpha TSH 50.5%; intact TSH 3.7%; beta TSH 0.07%; The affinity constant (K) of this Mab with respect to free alpha-subunit of hCG was found to be 1.5×10^7 l/mol as determined by the simple antibody dilution analysis method.

SUBSTITUTIONS OF TRP-138 BY GLY AND THR-103 BY ILE IN AMIDASE FROM *PSEUDOMONAS AERUGINOSA* ARE RESPONSIBLE FOR ALTERED KINETIC PROPERTIES AND ENZYME INSTABILITY

Karmali, A.^a, Pacheco, R.^a, Tata, R.^b and Brown, P. R.^b

^a Departamento de Engenharia Química Secção de Biotecnologia do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

^b Department of Biophysics and Molecular Biology, King's College London, Strand, London WC2.

Publicado em: *Molecular Biotechnology*, 17, 201-212, 2001.

Pseudomonas aeruginosa Ph1 is a mutant strain derived from strain AI3. The strain AI3 is able to use acetanilide as a carbon source through a mutation (T103I) in the *amiE* gene that encodes an aliphatic amidase (EC 3.5.1.4). The mutations in the *amiE* gene have been identified (Thr103Ile and Trp138Gly) by direct sequencing of PCR-amplified mutant gene from strain Ph1 and confirmed by sequencing the cloned PCR-amplified gene. Site-directed mutagenesis was used to alter the wild-type amidase gene at position 138 for Gly. The wild-type and mutant amidase genes (W138G, T103I-W138G, and T103I) were cloned into an expression vector and these enzymes were purified by affinity chromatography on epoxy-activated Sepharose 6B-acetamide/phenylacetamide followed by gel filtration chromatography. Altered amidases revealed several differences in kinetic properties, namely, in substrate specificity, sensitivity to urea, optimum pH, and enzyme stability, compared with the wild-type enzyme. The W138G enzyme acted on acetamide, acrylamide,

phenylacetamide, and p-nitrophenylacetamide, whereas the double mutant (W138G and T103I) amidase acted only on p-nitrophenylacetamide and phenylacetamide. On the other hand, the T103I enzyme acted on p-nitroacetanilide and acetamide. The heat stability of altered enzymes revealed that they were less thermostable than the wild-type enzyme, as the mutant (W138G and W138G-T103I) enzymes exhibited $t_{1/2}$ values of 7.0 and 1.5 min at 55 degrees C, respectively. The double substitution T103I and W138G on the amidase molecule was responsible for increased instability due to a conformational change in the enzyme molecule as detected by monoclonal antibodies. This conformational change in altered amidase did not alter its $M(r)$ value and monoclonal antibodies reacted differently with the active and inactive T103I-W138G amidase.

MONOCLONAL ANTIBODIES AGAINST AMIDASE FROM *PSEUDOMONAS AERUGINOSA*

Novo, C.^a Karmali, A.^b, Clemente, A.^a and Brown, P.R.^c

^a Departamento de Biotecnologia, Unidade de Tecnologia de Produção de Anticorpos monoclonais, INETI

^b Secção de Biotecnologia, Departamento de Engenharia Química do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

^c Department of Biophysics and Molecular Biology, King's College London, Strand, London WC2.

Publicado em: *Hybridoma*, 20, 273-279, 2001.

Amidase from *Pseudomonas aeruginosa* was purified by anionic exchange chromatography and used to immunise female Balb/c mice. Monoclonal antibodies (MAbs) were raised by hybridoma technology using Sp2/0 myeloma cells as fusion partner. A selected IgM subclass MAb was purified from in vitro hybridoma cell line supernatant by a two-step anionic exchange chromatography. The MAb was specific for amidase from *P. aeruginosa* as determined by Western blotting and recognized the native and denatured forms of the enzyme.

REFERENCE CORRELATION FOR THE VISCOSITY OF LIQUID TOLUENE FROM 313 TO 373 K AT PRESSURES TO 250 MPa

Marc Assael^a; Helena Avelino^b; João Fareleira^c; N. Dalaouti^a; Ken Harris^d;

^a Faculdade de Engenharia Química, Universidade Aristotle, Grécia.

^b Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Eng. Química

^c Instituto Superior Técnico, Departamento de Eng. Química

^d Colégio Universitário, Escola de Química, Austrália

Publicado em: *International Journal of Thermophysics*, 22(23), 789-799, 2001.

A correlation in terms of temperature and molar volume is recommended for the viscosity of liquid toluene as a reference for high-pressure viscosity measurements. The temperature range covered is from 213 to 373 K, and the pressure range from atmospheric up to 250 MPa. The standard deviation of the proposed correlation is 1.36% and, within a 95% confidence limit, the error is 2.7%. It is estimated that for densities up to 920 kg.m⁻³ the uncertainty of the viscosity values generated by this correlation is about $\pm 2\%$.

DIFFUSE REFLECTANCE STUDIES OF β -PHENYLPROPIOPHENONE AND BENZOPHENONE INCLUSION COMPLEXES WITH CALIX[4], [6] AND [8] ARENES

L.F. Vieira Ferreira^a; M.R. Vieira Ferreira^b; A. S. Oliveira^a; T.J.F. Branco^a; J.V. Prata^b; J.C. Moreira^c

^a Centro de Química-Física Molecular, Complexo Interdisciplinar, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa Codex, Portugal

^b Secção de Química Orgânica, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

^c Centro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, Fundação Oswaldo Cruz, Rua Leopoldo Bulhões 1480, Rio de Janeiro, RJ 21041-210, Brasil

Publicado em: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press. First published as an Advance Article on the web 5th December 2001(www.rsc.org/pccp).

The formation of inclusion complexes of β -phenylpropiophenone (β -PP) and benzophenone (BZP) with p-tert-butylcalix[4], [6] and [8]arenes (powdered solid samples) was studied with the use of diffuse reflectance techniques. Experimental evidence was obtained for inclusion in all cases. BZP $n \rightarrow \pi^*$ absorption shows an increase in cavity polarity with the increase of the calix ring. β -PP exhibits strong room temperature phosphorescence; this is a clear evidence for its inclusion within the calix molecules. Calix[4] and calix[8]arene provide a more rigid environment

to β -PP whereas calix[6]arene appears to be more flexible. Transient absorption spectra of inclusion complexes with BZP show major triplet formation in calix[4]arene, while the ketyl radical of BZP is formed with calix[6]arene and is predominant with calix[8]arene. Phenoxy radicals transient absorption is evident in the two latter cases. For β -PP phenoxy radicals are formed but not triplets or ketyl radicals in calix[4]arene; in calix[6] and calix[8]arene, strong support for ketyl radical of β -PP was found.

SÍNTESE DE DIAZENOCARBONILOS E SUA CONVERSÃO EM HETEROCICLOS DE AZOTO

Alexandra Isabel Martins Paulo da Costa

Mestrado em: *Química Orgânica Tecnológica*

Grau Concedido por: *Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa*

Orientador: *Professor Doutor José V. Prata*

Provas Concluídas em: *21 de Maio de 2001*

Síntese de oxindóis *N*-substituídos por aminação intramolecular de diazenodicarbonilos assimétricos.

Foram sintetizados e caracterizados diazenodicarbonilos do tipo $\text{Ar-CH}_2\text{-CON}_\alpha\text{HN}_\beta\text{HCO-R}$ com diferentes substituintes em N_β , utilizados como precursores na obtenção de diazenodicarbonilos, sendo feito um estudo comparativo de condições de oxidação recorrendo a diferentes oxidantes e condições reaccionais.

A indução da ciclização intramolecular dos diazenodicarbonilos obtidos foi estudada recorrendo a diversos ácidos de Lewis, avaliando-se a sua eficácia.

O modo de ciclização intramolecular observado (*5-exo trig*) foi tentativamente racionalizado através de uma nova proposta mecanística.

Alguns dos produtos resultantes da ciclização foram numa fase posterior sujeitos a procedimentos simples de desprotecção conduzindo à obtenção de *N*-aminoxindóis.

Isolamento e caracterização de 3-(*2H*)-cinolinonas obtidas a partir do rearranjo oxidativo de *N*-aminoxindóis na presença de oxidantes distintos.