

ANUÁRIO CIENTÍFICO



Resumos de Artigos, Comunicações, Teses e Livros

2002

INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA

Ficha Técnica

Edição

Conselho Científico do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa
Rua Conselheiro Emídio Navarro, n.º 1 1949-014 LISBOA
Tel. 218 317 010 • Fax: 218 317 009

Capa e Layout

José Coutinho

Produção Gráfica

2002 Estúdio Gráfico, Lda.
Tel. 21 931 73 44 • Fax: 21 931 73 51
estudio2002@netcabo.pt

Tiragem

500 Exemplares

Data

2003

Índice

<i>Nota Introdutória</i>	5
<i>Engenharia Civil</i>	9
<i>Engenharia de Electrónica de Telecomunicações e de Computadores</i>	33
<i>Engenharia Mecânica</i>	75
<i>Engenharia Química</i>	103
<i>Engenharia de Sistemas de Potência e Automação</i>	167
<i>Física</i>	185
<i>Matemática</i>	199

Nota Introdutória

O Conselho Científico do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa dá continuidade à publicação do Anuário Científico do ISEL com esta edição relativa ao ano de 2002.

Os trabalhos científicos, artigos, comunicações, teses e livros, cujos resumos integram este Anuário Científico são reveladores do entrosamento do nosso corpo docente com a comunidade científica (académica e de investigação) e são um indicador da qualidade do trabalho científico e de investigação realizado.

A investigação é uma das obrigações da academia. Esta actividade, por envolver o desconhecido e a procura de soluções inéditas, não se coaduna com a imposição de limitações, especialmente quando estas são artificiais. Todos aqueles que para o trabalho de investigação possuam competência devem, em nosso entender, ser estimulados a dar o seu contributo para o desenvolvimento da sociedade.

No âmbito do ensino da engenharia, estamos certos que as alterações legislativas em curso no nosso país, se forem orientadas no sentido do incremento da qualidade, terão em conta o real valor de cada instituição e saberão aproveitar o potencial humano, científico e tecnológico do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, quebrando o actual espartilho legal, cerceador de parte da actividade de I&D, que inibe, presentemente, a concessão dos graus académicos de Mestre e Doutor.

É nosso entendimento que a faculdade de atribuição, pelas instituições de ensino superior, dos graus de pós-graduação deve ser estabelecida com base em critérios, universais e predefinidos, afiançadores das competências específicas e garantes da qualidade dos resultados.

O Presidente do Conselho Científico



(Prof. Elmano Margato)

COLLOIDAL DIPOLAR INTERACTIONS IN 2D SMECTIC C FILMS

P. Patrício^{a,b}; M. Tasinkevych^b; M. M. Telo da Gama^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCentro de Física Teórica e Computacional da Universidade de Lisboa.

Publicado em: *Eur. Phys. J. E* **7**, 117 (2002)

We use a two-dimensional (2D) elastic free energy to calculate the effective interaction between two circular disks immersed in smectic-C films. For strong homeotropic anchoring, the distortion of the director field caused by the disks generates topological defects that induce an effective interaction between the disks. We use finite elements, with adaptive meshing, to minimize the 2D elastic free energy. The method is shown to be accurate and efficient for inhomogeneities on the length scales set by the disks and the defects, that differ by up to 3 orders of magnitude. We compute the effective interaction between two disk-defect pairs in a simple (linear) configuration. For large disk separations, D , the elastic free energy scales as D^{-2} , confirming the dipolar character of the long-range effective interaction. For small D the energy exhibits a pronounced minimum. The lowest energy corresponds to a symmetrical configuration of the disk-defect pairs, with the inner defect at the mid-point between the disks. The disks are separated by a distance that is twice the distance of the outer defect from the nearest disk. The latter is identical to the equilibrium distance of a defect nucleated by an isolated disk.

GEOMETRICALLY-CONTROLLED TWIST TRANSITIONS IN NEMATIC CELLS

P. Patrício^{a,b}; M. M. Telo da Gama^b; S. Dietrich^{c,d}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCentro de Física Teórica e Computacional da Universidade de Lisboa; ^cMax-Planck-Institut für Metallforschung; ^dInstitut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart.

Publicado em: *Phys. Rev. Lett.* **88** 245502 (2002)

We study geometrically-controlled twist transitions of a nematic confined between a sinusoidal grating and a flat substrate. In these cells the transition to the twisted state is driven by surface effects. We have identified the mechanisms responsible for the transition analytically and used exact numerical calculations to study the range of surface parameters where the twist instability occurs. Close to these values the cell operates under *minimal* external fields or temperature variations.

COLLOIDAL INTERACTIONS IN TWO-DIMENSIONAL NEMATICS

M. Tasinkevych^b; N. M. Silvestre^b; P. Patrício^{a,b}; M. M. Telo da Gama^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCentro de Física Teórica e Computacional da Universidade de Lisboa.

Publicado em: *Eur. Phys. J. E* **9**, 341-347 (2002)

The interaction between two disks immersed in a 2D nematic is investigated (i) analytically using the tensor order parameter formalism for the nematic configuration around isolated disks and (ii) numerically using finite element methods with adaptive meshing to minimize the corresponding Landau-de Gennes free energy. For strong homeotropic anchoring, each disk generates a pair of defects with one-half topological charge responsible for the 2D quadrupolar interaction between the disks at large distances. At short distance, the position of the defects may change, leading to unexpected complex interactions with the quadrupolar repulsive interactions becoming attractive. This short range attraction in all directions is still anisotropic. As the distance between the disks decreases their preferred relative orientation with respect to the far-field nematic director changes from oblique to perpendicular.

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

M.J. Santos^a; A. J. Silvestre^b; O. Conde^a

^aDepartamento de Física, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^bInstituto Superior de Transportes, present address: Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Surface and Coatings Technology* **151-152** (2002) 160.

Rhombohedral B₄C coatings were synthesised on fused silica substrates by CO₂ laser-assisted chemical vapour deposition (LCVD), using a dynamic reactive atmosphere of BCl₃, C₂H₄ and H₂. Films with carbon content from 15 to 22 at.% were grown at deposition rates as high as 0.12 μm.s⁻¹. The

kinetics of the reactive system used to deposit the B₄C films and the influence of growth conditions on the structure and morphology of the deposits were investigated.

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

A. J. Silvestre^a; M. J. Santos^b; O. Conde^b

^aInstituto Superior de Transportes, present address: Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bDepartamento de Física, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.

Publicado em: *Key Engineering Materials* **230-232** (2002) 56.

This paper focuses on the synthesis of rhombohedral B₄C (r-B₄C) coatings by CO₂ laser-assisted chemical vapour deposition (LCVD), using a dynamic reactive atmosphere of BCl₃, 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 over the use of methane, which is the conventional carbon precursor in CVD processes. These advantages are mainly related to its high absorption coefficient at the laser wavelength and a higher sticking coefficient, which enables to attain higher deposition rates and film thickness control at lower carbon precursor concentration. Films with carbon content from 15 to 22 at.% were grown at a deposition rate as high as 0.12 μm.s⁻¹.

ANISOTROPIC TOMOGRAPHY OF THE ATLANTIC OCEAN

Graça Silveira^{a,b}; Eléonore Stutzmann^c

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^cInstitut de Physique du Globe de Paris.

Publicado em: *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, Vol. 132, pp. 237-248 (2002)

We present the first regional tri-dimensional model of the Atlantic Ocean with anisotropy. The model, derived from phase velocity measurements, is defined from the Moho down to 300 km depth. The Mid Atlantic Ridge is a shallow structure in the North Atlantic corresponding to a negative velocity anomaly down to about 150 km depth. In contrast, the ridge negative signature is visible in the South Atlantic down to the deepest depth inverted. This difference is probably related to the presence of hot-spots along or

close to the ridge axis in the South Atlantic and may indicate a different mechanism for the ridge between the North and South Atlantic. Negative velocity anomalies are clearly associated with hot-spots at least 300km depth, and seem to be connected along a North-South direction. In most parts of the Atlantic, the azimuthal anisotropy directions remain stable with increasing depth. The hot-spot anisotropy signature is striking beneath Bermuda, Cape Verde and Fernando Noronha islands where the fast S-wave velocity direction seems to diverge radially from the hot-spots.

MAGNETIC AND PLAGIOCLASE LINEAR FABRIC DISCREPANCY IN DYKES : A NEW WAY TO DEFINE THE FLOW VECTOR USING MAGNETIC FOLIATION

Laurent Geoffroy^a; Jean-Paul Callot^a; Charly Aubourg^b; Mário Moreira^{c,d}

^aUniversité du Mans, France; ^bUniversité Cergy-Pontoise, France; ^cInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^dCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa.

Publicado em: *Terra Nova, Vol. 14, n°3, 183-190 (2002)*

In basaltic dykes the magnetic lineation K1 (maximum magnetic susceptibility axis) is generally taken to indicate the flow direction during solidification of the magma. This assumption was tested in Tertiary basaltic dykes from Greenland displaying independent evidence of subhorizontal flow. The digital processing of microphotographs from thin sections cut in (K1, K2) planes yields the preferred linear orientation of plagioclase, which apparently marks the magma flow lineation. In up to 60% of cases, the angular separation between K1 and the assumed flow direction is greater than 45°. This suggests that the uncorroborated use of magnetic lineations in dykes is risky. A simple geometrical method is proposed to infer the flow vector from AMS in dykes based solely on magnetic foliations.

PROPRIEDADES REOLÓGICAS DE SOLUÇÕES LIOTRÓPICAS DE ACETOXIPROPILCELULOSE EM DIMETILACETAMIDA

M. T. Cidade^a; C.R. Leal^b; P. Navard^c

^aDepartamento de Ciência dos Materiais e CENIMAT, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa; ^bInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^cCentre de Mise en Forme des Matériaux, École des Mines de Paris.

Publicado em: *e-rheo.pt*, 2, 1, 2002

(revista on line: <http://www.dep.uminho.pt/e-rheo.pt>)

(...). Neste trabalho apresentamos as propriedades reológicas de soluções liotrópicas de APC em dimetilacetamida (DMAc). A viscosidade, η , e a primeira diferença de tensões normais, N_1 , foram medidas para concentrações (em peso) de APC que vão desde a fase isotrópica (51.7 %) até concentrações elevadas no regime anisótropo (80.2%), a 25 °C e para taxas de deformação entre 1 e 1000 s⁻¹. A viscosidade da solução isotrópica apresenta o comportamento típico dos polímeros flexíveis. (...). Contrariamente ao que acontece com outros sistemas liotrópicos [4 a-c; 5 a-c; 6 a, b e 7 a-c], o sistema APC/DMAc apresenta um crescimento contínuo de N_1 em função da taxa de corte, ainda que para as taxas mais elevadas pareça ocorrer uma diminuição ou uma inflexão de N_1 em função de $\dot{\gamma}$, dependendo da concentração, o que leva a crer que, caso as taxas de deformação mais elevadas fossem experimentalmente acessíveis, se poderia encontrar uma região de $N_1(s)$ negativos, até uma dada concentração. (...).

SHEAR-WAVE POLARIZATION ANALYSIS OF THE EARTHQUAKE SEQUENCE FOLLOWING THE JULY 9TH 1998 FAIAL EARTHQUAKE: PRELIMINARY RESULTS

Nuno A. Dias^{a,b}; L. Matias^{b,c}; J. Tellez^d; L. Senos^e; J. L. Gaspar^f; D. Vales^e

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^cFaculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; ^dUniversidad Complutense de Madrid; ^eInstituto de Meteorologia; ^fCentro de Vulcanologia da Universidade dos Açores.

Publicado em: *Proceedings da 3ª Assembleia Hispano Portuguesa de Geodesia e Geofísica, Valência, Espanha, Fevereiro de 2002.*

The seismic swarm that followed the 1998-07-09 Faial (Azores) earthquake generated a database of thousands of 3-comp. seismograms. We present preliminary results of the shear-wave polarization analysis performed to the records and its possible correlation with the presence of crustal seismic anisotropy underneath the stations. From the database we selected 112 events, for which the focal parameters were better constrained. For SET station (Pico) there's a clear evidence for a dominant SE-NW polarization direction and the presence in most of the records of shear-wave splitting,

indicating the presence of anisotropy coherent with the local tectonic features. In the case of SAL station (in Faial, closest to the main epicenter), although there's evidence for the presence of shear-wave splitting, the S-wave polarization direction is not stable. As for the rest of the stations, there are some traces of dominant polarization and shear-wave splitting but the data selection criteria excludes most of the records thus reducing the possibility to reach any kind of result statistically valid.

ULISSEIS – UNIVERSITY OF LISBON SEISMIC NETWORK

Patrícia L. Silva^a; Graça Silveira^{a,b}

^aCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^bInstituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of the 3rd Assembleia Hispano Portuguesa de Geodesia e Geofísica, Valência, Espanha, Fevereiro de 2002.*

The purpose of ULISSEIS – University of LISbon SEISmic network – is the installation, operation and co-operation of 6 stations in the standard configuration defined by the Federation of Digital Seismograph Networks – FDSN (Dziewonkski, 1994) (VBB 24 bit, continuous recording at 20 samples/s). We intend to complete the installation and re-installation of all the 4 broad band stations during 2002. Our efforts are now focussed on the organization of a Data Center. This Data Center will enable the smooth flow of data from the CGUL stations to the seismological research community. A station book similar to the FDSN station book, including the description of the sites and the instrument transfer functions is being prepared. This work was sponsored by RIOSA (Ref. PRAXIS3/3.2/EMG/1969/95) and STAMINA (Ref. PDCTM/PP/MAR/15255).

HOT-SPOTS SIGNATURE IN THE ATLANTIC TOMOGRAPHIC MODEL

Graça Silveira^{a,b}; Éleonore Stutzmann^c; Luís Mendes-Victor^d

^aCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^bInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^cInstitut de Physique du Globe de Paris; ^dInstituto Geofísico do Infante D. Luís.

Publicado em: *Proceedings of the 3rd Assembleia Hispano Portuguesa de Geodesia e Geofísica, Valência, Espanha, Fevereiro de 2002.*

We present a regional tri-dimensional model of the Atlantic Ocean with anisotropy. The model, derived from Rayleigh and Love waves is defined from the Moho down to 300 km depth with a lateral resolution of about 500 km and is presented in terms of average isotropic S-wave velocity, azimuthal anisotropy and transverse isotropy. Negative velocity anomalies are clearly associated with hot-spots from the surface down to at least 300 km depth. In near ridge hot-spots a low velocity channel it is visible between the hotspots and the ridge. The hot-spot anisotropy signature is striking beneath Bermuda, Cape Verde and Fernando Noronha islands where the fast S-wave velocity direction seems to diverge radially from the hot-spots. The Atlantic average radial anisotropy is similar to that of PREM model, that is positive down to about 220 km, but with slightly smaller amplitude and null deeper. Most hot-spots and the South Atlantic ridge are associated with larger than average radial anisotropy.

COORDINATED SEISMIC EXPERIMENT IN THE AZORES (COSEA)

Graça Silveira^{a,b}; Suzan van der Lee^c; Eleonore Stutzmann^d; Luis Matias^a; David James^e; Peter Burkett^e; Miguel Miranda^a; Luis Mendes Victor^f; João Luis Gaspar^g; Luisa Senos^h; Sean Solomon^e; Jean-Paul Montagner^d; Domenico Giardini^c

^aCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^bInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^cInstitute of Geophysics, ETH Honggerberg; ^dInstitut de Physique du Globe de Paris; ^e Depart. of Terrestrial Magnetism, Carnegie Inst. of Washington; ^fInstituto Geofísico do Infante D. Luís; ^gCentro de Vulcanologia da Univ. dos Açores; ^hInstituto de Meteorologia.

Publicado em: *ORFEUS Newsletter*, Vol. 4, nº 2 (2002)

The Memorandum of Understanding COSEA is devoted to coordinate the efforts of Portuguese, French, American and Swiss scientific institutions for the deployment, operation and maintenance of a temporary broadband seismic experiment in the Azores Islands and for the collection, distribution and scientific exploitation of data.

In collaboration with other running projects, this experiment will highly contribute to the determination of the deep origin and structure of the Azores plume, the interaction between the Azores plume and the Mid-Atlantic Ridge and will also contribute the investigation of the structure and deep interactions of the plate boundaries between Eurasia, Africa and North America. Locally, the combination of the broadband data with the existing

volcano and earthquake surveillance networks will enable the monitoring of the seismic and volcanic activity toward a better determination of hazard.

SUMMO/AÇORES UNIFIED SYSTEM FOR THE GEOPHYSICAL MONITORING AND MODELLING OF THE AZORES REGION

João Luis Gaspar^a; Miguel Miranda^{b,c}; Luisa Senos^d; Luis Matias^{b,c}; Graça Silveira^{b,e}; Gabriela Queirós^a

^aCentro de Vulcanologia da Univ. dos Açores; ^bCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^cDepartamento de Física da Univ. De Lisboa; ^dInstituto de Meteorologia; ^eInstituto Sup. de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of the second MOMAR (Monitoring the Mid-Atlantic Ridge) Workshop, Horta, Azores, Junho 2002.*

SUMMO/AÇORES is a project directed to the development of the Azores regional geophysical network that started in 1997 with the well-succeeded cooperation between the Azores University and the Meteorological Institute. The main objective of the project is to update and improve the existing geophysical networks creating a structure to serve the scientific community, the civil protection and the public in general.

The safety of populations exposed to geological risks such as earthquakes and volcanic eruptions obliged to the existence of monitoring networks based on independent techniques. In Portugal, this subject is particularly important for regions like the Azores, where earthquakes and volcanic eruptions are a permanent threat to all the inhabitants.

The different technologies of seismic monitoring associated with accurate GPS observations are basic tools to achieve such goals.

MASHA MULTI-SCALE APPROACH FOR SEISMOVULCANIC HAZARD IN THE AZORES

Luis M. Matias^{a,b}; Graça M. Silveira^{a,c}; Nuno A. Dias^{a,c}; Patrícia L. Silva^{a,b}; João L. Gaspar^d; Teresa Ferreira^d; Carlos Faria^d; Miguel M. Miranda^{a,b}; Luisa C. Senos^e

^aCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^bDepartamento de Física da Univ. de Lisboa; ^cInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^dCentro de Vulcanologia da Univ. dos Açores; ^eInstituto de Meteorologia.

Publicado em: *Proceedings of the second MOMAR (Monitoring the Mid-Atlantic Ridge) Workshop, Horta, Azores, Junho de 2002.*

MASHA is a project dedicated to study the processes that constrain and shape the volcanic and seismic hazard of the Azores area, using seismic and geochemical monitoring. The MASHA is structured as a multi-scale scientific approach to investigate the earth processes at: the regional scale – the Azores mantle plume and hot spot; the mesoscale – the crustal structure; and the local scale – the tectonic and volcanic structures that directly affect the island populations.

The first scale regards the study of the regional setting, mainly the anomalous lithosphere and asthenosphere structure of the Azores and its contribution to the episodic volcanic and seismic activity. The Mesoscale – 10's of km – regards crustal scale studies namely the seismic anisotropy, its correlation with crustal strain as well as its relationship with seismic and volcanic events. The local scale – 1 km – regards the assessment of seismic and volcanic hazard, in the area of Faial, Pico and S. Jorge islands. We present some preliminary results obtained in the framework of the project.

O RUÍDO

Carlos César Correia Rodrigues^{a,b}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bSpectris Portugal.

Apresentado em: *I^{as} Jornadas Técnicas de Metrologia – Associação Nacional de Técnicos de Metrologia – Lisboa, 2 de Outubro de 2002.*

A entrada em vigor a 14 de Maio de 2001 do Decreto-Lei n° 292/2000, também denominado Regime Legal Sobre a Poluição Sonora, determinou a revogação do Decreto-Lei n° 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.

Porque os equipamentos utilizados em medições acústicas devem ter, de acordo com a legislação em vigor, controlo metrológico periódico sem o qual e no âmbito da Metrologia Legal, os resultados das medições não podem ser considerados, decidiu a Associação Nacional de Técnicos de Metrologia incluir nas suas 1^{as} Jornadas uma comunicação sobre a relevante importância com que o Ruído, nas suas mais diversas vertentes, surge nos dias de hoje.

ACÚSTICA AMBIENTAL E DE EDIFÍCIOS

Carlos César Correia Rodrigues^{a,b}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bSpectris Portugal.

Apresentado em: *1^{as} Jornadas Técnicas do Curso de Engenharia Civil e do Ambiente – Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Viana do Castelo – Viana do Castelo, 24 de Outubro de 2002.*

Sendo a Acústica uma disciplina transversal no campo da Engenharia, é nas áreas da Engenharia do Ambiente e da Engenharia Civil que a sua relevância assume o mais elevado patamar.

De facto, a Acústica Ambiental (Engenharia do Ambiente) é responsável pelo estudo das condições acústicas existentes no dia-a-dia das populações, enquanto que no campo da Acústica de Edifícios (Engenharia Civil) são estudadas as condições de propagação e condicionamento dos campos sonoros, nomeadamente em termos da Acústica Arquitectural e da Acústica de Salas.

Assim, é com naturalidade que se observa a inclusão de uma comunicação sobre Ruído Ambiental e Acústica de Edifícios numas 1^{as} Jornadas do Curso de Engenharia Civil e do Ambiente, como as que ocorreram no passado mês de Outubro de 2002, na Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Viana do Castelo.

**DYKES, ASM ET FLUX MAGMATIQUES AU-DESSUS DES PANACHES
MANTELLIQUES ET DES POINTS CHAUDS: THÉORIE ET EXEMPLES AUX
AÇORES, EN ECOSSE ET AU GROENLAND**

Laurent Geoffroy^a; Jean-Paul Callot^a; Mário Moreira^{b,c}; Charly Aubourg^d; Marie Etilé^a

^aUniversité du Mans, France; ^bInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^cCentro de Geofísica da Universidade de Lisboa; ^dUniversité Cergy-Pontoise, France.

Apresentado em: *La fabrique magnétique: Méthodes & Applications - Journée spéciale de la Société Géologique de France, Paris, Novembro de 2002.*

La compréhension des modes de transfert des magmas basiques du manteau en fusion à la croûte continentale et à la surface de la terre est un objectif géodynamique important. Il s'agit, en conjonction avec les données pétrologiques et géochimiques, de comprendre si la fusion mantellique est localisée ou distribuée. Dans le premier cas, les vecteurs d'écoulement magmatique dans la croûte supérieure doivent être, de manière dominante, horizontaux et dans le second cas verticaux. Nous montrons à partir de différents exemples d'interaction d'une anomalie thermique du manteau avec une lithosphère, continentale (Groenland, Ecosse) et océanique (Açores), en contexte intraplaque (trapps d'Ecosse) comme limite de plaques (marge volcanique du Groenland, Açores), que l'ASM dans les dykes basaltiques peut-être l'un des moyens déterminants pour résoudre cette problématique. Nous montrons aussi qu'il est préférable d'être très prudent dans les rapports entre fabriques magnétique, magmatique des ferromagnétiques et direction réelle d'écoulement du magma lors de l'intrusion des filons magmatiques.

TATOR FLUX VECTOR CONTROL WITH REFERENCE FLUX COMPENSATION FOR INDUCTION MOTORS

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: Journal of Electrical Engineering “Politehnica” Publishing House (ISSN 1582-4594), Edition N° 1/2002 (Journal 3), versão electrónica em: <http://www.jee.ro/archives.htm>, Janeiro 2002.

Resumo: An improvement to the Stator Flux Vector Control (SFVC) method of induction motors is presented and analyzed in this paper. It is verified that the original method has an inherent steady state error especially evident on the torque response. This occurrence was verified both in simulation and in the laboratory. To solve this problem, a control strategy is presented in this paper, based on the insertion of a delay compensation block in series with the stator flux linkage references. The theoretical study is done with a simplified model of the machine, of the converter and of the control law. This approach allows the identification and solution of the problem. An experimental setup was implemented in the laboratory, using a fast controller with a digital signal processor. Experimental results are presented showing good agreement with the theory.

ENSINO EXPERIMENTAL DA ELECTRÓNICA DE REGULAÇÃO E COMANDO COM MÓDULOS COMPACTOS DE POTÊNCIA E DE GUIAMENTO DE SINAIS

José Faria^(a), Paulo Gambôa^(a), Luisa Ferreira^(a)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: TAAE'02, - V Congresso de Tecnologías Aplicadas a la Enseñanza de la Electrónica, em Las Palmas, pp 377-380, Fevereiro 2002.

Resumo: A disciplina de Electrónica de Regulação e Comando (ERC) no Departamento de Engenharia Electrotécnica e Automação (DEEA) do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (ISEL) abrange o estudo integrado de dispositivos electrónicos em sistemas completos de electrónica industrial. O desafio inerente ao seu ensino experimental consiste em que o mesmo se realize a partir de dispositivos electrónicos comercializáveis, promovendo tanto quanto possível a necessária aproximação à realidade industrial.

A recente comercialização de módulos híbridos de potência apropriados para a realização compacta de onduladores de tensão trifásicos especialmente direccionados para a indústria dos accionamentos com máquinas de corrente alternada, veio propiciar a concretização deste objectivo.

São apresentadas algumas características, potencialidades e exigências desta tecnologia. Mostra-se a título de exemplo a sua aplicação ao projecto de um conversor de contínua para contínua (*chopper*) com funcionamento nos quatro quadrantes. São apresentados resultados experimentais de ensaios efectuados em laboratório.

O ENSINO EXPERIMENTAL NA ÁREA DE ELECTROMETRIA E INSTRUMENTAÇÃO – UM EXEMPLO CONCRETO: SISTEMAS DE 2ª ORDEM

Francisco Rodrigues^(a), Nuno Cardoso^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: TAAE'02 - V Congreso de Tecnologías Aplicadas a la Enseñada de la Electrónica, em Las Palmas, pág. 373-376, Fevereiro 2002.

Resumo: Este artigo pretende, através dum exemplo concreto, sistemas de 2ª ordem, mostrar uma experiência de diferentes abordagens numa mesma questão, realizadas em diferentes momentos no desenvolvimento curricular dum curso de Engenharia Electrotécnica, tendo como objectivo transmitir aos alunos uma melhor concretização das respostas previstas teoricamente e, simultaneamente, pondo em evidência algumas aplicações concretas. Concomitantemente, constitui um exemplo de utilização de diferentes ferramentas, com aplicação útil em diferentes áreas.

UTILIZAÇÃO DO SIMULINK NA SIMULAÇÃO DE RECTIFICADORES NÃO CONTROLADOS COM CARGA CAPACITIVA

Vasco Soares^{(a)(b)}, Pedro Verdelho^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico – Centro de Automática da UTL

Publicado em: TAAE'02 - V Congreso de Tecnologías Aplicadas a la Enseñada de la Electrónica, pág. 381-384, em Las Palmas, Fevereiro, 2002.

Resumo: O presente artigo tem por objectivo mostrar as potencialidades da utilização do software de simulação SimulinkTM funcionando em ambiente MatlabTM no ensino da electrónica de potência. Pretende-se realizar a simulação de rectificadores monofásicos e trifásicos não controlados com carga capacitiva através da síntese dos seus modelos de funcionamento, mostrando as potencialidades desta ferramenta de simulação sem recurso aos tradicionais simuladores analógico-digitais.

RISE TIME REDUCTION IN HIGH-VOLTAGE PULSE TRANSFORMERS USING AUXILIARY WINDINGS.

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

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

Publicado em: IEEE Transactions on Power Electronics, March 2002, vol. 17, nº2, pp. 196-206.

Resumo: Today high-voltage pulses are reaching more fields of application. High-voltage pulse transformers are often used in association with high-voltage pulse generating circuits to further increase the pulse output voltage level. However, because of the transformer parasitic elements involved, the transformer is the critical device in shaping the rising characteristics of the output pulse. One of the techniques usually adopted to decrease the leakage inductance of the transformer adds two auxiliary windings to the transformer. If properly used, these auxiliary windings reduce the leakage flux and, therefore, the leakage inductance. As a result the pulse rise time is reduced.

ON THE STUDY OF STANDARDS AND REGULATIONS IN ELECTRICAL ENGINEERING

João Palma^{(a)(b)}; Constantino Soares^(a); Elmano Margato^(a); Jorge Esteves^(c); Maria João Martins^(c)

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

Publicado em: Proceedings of the 13th Conference of the European Association for Education in Electrical and Information Engineering, York, April 2002

Resumo: Standards, regulations, codes and directives are technical documents of great importance for all engineering domains and particularly for electrical engineering. Although it becomes evident that this subject should be part of university curricula for an effective response to industry needs, generally it is not given the appropriate academic treatment. After discussing a number of reasons for that omission, some rules are proposed for the success of the inclusion of this kind of topic in engineering curricula. A special reference is made, as an example, to industrial automation and electronics fields.

TRANSFORMADORES DE ALTA-FREQUÊNCIA PARA FONTES DO TIPO FORWARD – SATURAÇÃO E MAGNETISMO REMANESCENTE.

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

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

Publicado em: Actas das VII Jornadas Científico-Tecnológicas de Engenharia Electrotécnica e Electrónica, ESTS, Campus do IPS, de 16 a 17 de Abril de 2002, pp. 29 a 38.

Resumo: No dimensionamento de transformadores de alta frequência utilizados em fontes comutadas do tipo forward, com malha de desmagnetização do tipo RCD, o núcleo do transformador funciona

apenas no primeiro quadrante do plano B-H. Para se obter o valor máximo da densidade de fluxo é necessário adicionar a densidade de fluxo remanescente ao valor da densidade de fluxo calculado pela Lei de Faraday utilizada no cálculo do número de espiras dos enrolamentos. Com este tipo de funcionamento, a permeabilidade do circuito magnético é reduzida repercutindo-se na diminuição da indutância de magnetização e no incremento da corrente de magnetização. Neste artigo estudam-se os efeitos do funcionamento do transformador unicamente no primeiro quadrante, do plano B-H, de forma sustentada em ensaios experimentais. Mostra-se que a saturação magnética do núcleo do transformador está, para uma dada tensão de alimentação, fortemente dependente do valor da densidade de fluxo remanescente, e do efeito da introdução de entreferro no circuito magnético.

APLICAÇÃO DE UM CONTROLADOR RÁPIDO NA ESTIMAÇÃO DE GRANDEZAS ELÉCTRICAS UTILIZADAS EM ACCIONAMENTOS ELECTROMECHANICOS

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

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002.

Resumo: A utilização de controladores rápidos para processamento digital de sinal e para funções de controlo tem aumentado consideravelmente em várias áreas da Engenharia Electrotécnica. A sua grande aceitação é especialmente visível em aplicações que exigem uma grande rapidez de cálculo e de resposta. Acompanhando todo este interesse, os fabricantes deste tipo de equipamento têm vindo a desenvolver controladores, com características de desempenho tais, que tornam viáveis certas tarefas complexas de controlo e de estimação em tempo real que antes eram inviáveis. Neste artigo são testadas as potencialidades de um controlador rápido com processador digital de sinal (DSP), utilizado na estimação de algumas grandezas eléctricas aplicadas em accionamentos electromecânicos de baixa potência. Este controlador foi ensaiado numa aplicação experimental de controlo directo de binário (DTC) com a máquina assíncrona trifásica. A implementação de algoritmos de observação de fluxos e do binário, para além da própria função de controlo, permitiu que fossem exploradas algumas características importantes de rapidez no processamento e na conversão analógica-digital do sistema e de cadenciamento das tarefas. São também apresentados, neste artigo, resultados experimentais obtidos com a técnica de controlo referida, mostrando o desempenho deste tipo de equipamento integrado em aplicações que exigem uma grande rapidez de cálculo de algumas grandezas eléctricas não mensuráveis directamente.

APROVEITAMENTO DE BIOGÁS COMO FONTE DE ENERGIA ALTERNATIVA PARA PRODUÇÃO DE ENERGIA ELÉCTRICA

Rafael Rodrigues^(a), José Faria^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio de 2002.

Resumo: Neste artigo é apresentado um estudo de aproveitamento do biogás gerado no Aterro Sanitário de Mato da Cruz, que aborda algumas das recomendações do Conselho Mundial da Energia: diminuição das emissões dos gases com mais influencia no “efeito de estufa” e aumento da produção de energia com recurso a fontes renováveis. Os resíduos sólidos urbanos acumulados num aterro sanitário produzem, em certas condições de humidade e temperatura, o biogás. Este gás pode conter 50% de metano e poder calorífico inferior suficiente para ser usado após algum tratamento específico (filtragem, secagem,...). A utilização do biogás como combustível de motores de combustão interna adaptados, associados a geradores eléctricos, apresenta-se como uma excelente opção de aproveitamento. Os indicadores de avaliação económica de projectos de investimento, são suficientemente bons para estimularem um estudo mais rigoroso. O estudo subjacente a este artigo foi realizado no âmbito dos cursos de Mestrado que os autores frequentam, no IST.

BANCADA PARA ENSAIO DE SUSPENSÕES ELECTROMAGNÉTICAS RODOVIÁRIAS

Paulo Gambôa^(a), Ismênio Martins^(b), Jorge Esteves^(c), Elmano Margato^(a), Miguel Louro^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Escola Superior de Tecnologia – Universidade do Algarve; ^(c) Instituto Superior Técnico

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002.

Resumo: O desenvolvimento de novos materiais ferromagnéticos, da electrónica de potência e das técnicas de controlo, permitem a construção de actuadores lineares electromagnéticos de pequenas dimensões e considerável força, permitindo a sua aplicação em suspensões automóveis. Neste artigo propõe-se analisar a utilização deste tipo de actuator na simulação de diferentes tipos de suspensões, utilizando uma bancada de ensaios. Será igualmente descrita a estrutura e constituição da referida bancada de ensaios.

CONVERSOR AC-DC REVERSÍVEL PARA ADAPATAÇÃO A VARIADORES DE VELOCIDADE INDUSTRIAIS

F. Louro^(a), J. Lopes^(a), J. Palma^(a), E. Margato^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002.

Resumo: Nesta comunicação é apresentado o projecto e a realização experimental de um conversor estático reversível destinado a ser interposto entre a rede de energia eléctrica e um variador de velocidade dum accionamento, com a finalidade de permitir reversibilidade no sentido de fluxo de energia, manutenção de factor de potência unitário e solicitação de correntes com baixo teor harmónico, apresentando ainda outras potencialidades que se analisam. O conversor tem a topologia de um ondulator de tensão trifásico em ponte a IGBT, operando como rectificador de comutação forçada, e foi realizado com base em módulo compacto de tecnologia moderna. O sistema proposto foi testado com um variador electrónico de velocidade de motores assíncronos trifásicos mas pode ser usado igualmente noutros accionamentos com máquinas de corrente alternada alimentadas por onduladores de tensão e com máquinas de corrente contínua alimentadas por choppers.

ESTIMAÇÃO DOS SINAIS DE RETROACÇÃO PARA O CONTROLO VECTORIAL DE UM MOTOR DE INDUÇÃO USANDO REDES NEURONAIS

José Caldeano^(a); Gil Marques^(b); José Carlos Quadrado^(a)

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

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002.

Resumo: O motor de indução está bastante generalizado em processos industriais. A implementação de controlo com estas máquinas, apresenta problemas devido à difícil aquisição de grandezas variáveis da máquina. O trabalho consiste na modelização de um sistema de accionamento electromecânico com utilização de um motor de indução, em que se pretende a estimação dos sinais de retroacção da máquina. A modelização é efectuada com algoritmos de aprendizagem baseados em redes neuronais. Estes são responsáveis pela obtenção de uma relação funcional que modeliza o comportamento dinâmico do accionamento, a partir de um conjunto de dados experimentais previamente aprendidos.

ESTIMAÇÃO EM TEMPO REAL DA RESISTÊNCIA DO ROTOR EM MOTORES DE INDUÇÃO

Isaías Rodrigues^(a); Gil Marques^(b); José Carlos Quadrado^(a)

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

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002..

Resumo: As vantagens da utilização da máquina de indução trifásica de rotor em curto-circuito são hoje sobejamente reconhecidas. A sua utilização em accionamentos electromecânicos encontra-se cada vez mais generalizada em processos industriais onde, por vezes, há grandes exigências económicas e sobretudo de desempenho. Para se conseguir esse desempenho, os parâmetros eléctricos têm de ser conhecidos com precisão. Este trabalho consiste na identificação dos parâmetros do motor de indução de rotor em curto-circuito.

O método consiste em comparar os parâmetros de um motor real com os de um modelo equivalente. Desta comparação resultará, eventualmente, um erro que será anulado através do ajuste automático dos parâmetros do modelo. Os novos parâmetros deste serão, então, os que se queriam estimar para o motor real.

GERADORES PULSADOS DE ALTA TENSÃO BASEADOS EM SEMICONDUTORES.

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

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

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio de 2002.

Resumo: Hoje em dia, os geradores pulsados de alta tensão (GPAT) têm aplicações que vão desde o tratamento industrial de metais e semicondutores, até ao diagnóstico e tratamento médico. Neste quadro, os GPAT baseados em semicondutores têm, em relação aos circuitos baseados em válvulas, a grande vantagem de não necessitar de fontes de alimentação auxiliar com potência elevada, e o facto da reduzida queda de tensão à condução dos semicondutores resultar num elevado rendimento para estes circuitos. No entanto, existem algumas desvantagens inerentes à utilização dos semicondutores, como a máxima tensão suportada por estes, que actualmente não excede alguns kilovolts, e a sensibilidade a transitórios.

Neste artigo, após uma breve apresentação dos dispositivos de estado sólido normalmente utilizados como interruptores nos GPAT, discutem-se várias topologias destes circuitos baseadas em semicondutores. São ainda apresentados alguns exemplos práticos, elucidativos do potencial das montagens propostas.

PROTÓTIPO DE GESTÃO PARA SISTEMAS DE AUTOPRODUÇÃO

A. C. Borges^(a) ; P. M. Fonte^(b); J.C. Quadrado^(b)

^(a) Electricidade dos Açores, S.A.; ^(b) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002.

Resumo: Neste artigo apresenta-se um problema matemático de optimização de um sistema de autoprodução de energia. Discute-se o problema, de modo a criar um algoritmo para um sistema de autoprodução. Apresenta-se um caso de estudo baseado em preços reais do mercado Português. Descreve-se o protótipo laboratorial desenvolvido onde se pode emular o problema estudado. Conclui-se ainda que a aproximação estudada apresenta bons resultados para um protótipo de autoprodução de potência reduzida.

SISTEMA ELECTROMECHANICO DE EMULAÇÃO DE UM SISTEMA DE VÔO

R. J. Luís^(a), R. Pereira^(a), F. A. Barata^(a), J. C. Quadrado

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: CCTE'2002, Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Maio 2002.

Resumo: Neste trabalho propõe-se o desenvolvimento de uma plataforma com actuadores electromecânicos que visam preconizar uma solução inovadora, com custos reduzidos e com elevado grau de incorporação tecnológica, no campo dos simuladores de voo que actualmente recorre a actuadores hidráulicos, substituindo-os por actuadores electromecânicos. Por forma a estudar o comportamento da plataforma proposta recorre-se à modelização e simulação da mesma.

LABORATORY PROTOTYPE OF AN INDUSTRIAL ACTUATOR FOR MARBLE CUTTING AND CASTING

José Carlos Quadrado^(a), Nuno Amorim^(a), Victor Pires^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: Mechatronics 2002, 8th Mechatronics Forum International Conference, Junho 2002, ISBN 90 365 17672.

Resumo: The paper presents some advances proposed for a laboratory prototype of an industrial actuator used in marble cutting and casting. The emphasis is placed into the control of the actuator used for this application, particularly if the handling of several types of marble is intended. The use of an intelligent controller together with induction motors can improve the actuator performance in the presence of variable loads as well as reducing the global system cost. Some preliminary laboratory results are presented to testify the potential of this approach.

ITERATIVE APPROACH TO BASIC RELUCTANCE MOTOR CONTROL

José Carlos Quadrado ^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: WSEAS Transactions on Circuits, N°1, vol. 1, pp. 119-124, Julho 2002, ISSN 1109-2734.

Resumo: A feedback gain tuning method is proposed to control electromechanical actuators that have the characteristic applicable to iterative trial movements. The tuning algorithm is composed of an optimisation procedure based on the Complex Method and does not require any dynamic model of controlled systems. It tunes the feedback gain under an arbitrary performance index and is applicable to both linear and non-linear control laws. Furthermore, the algorithm is concise and has a few adjusting parameters. The tuning process is strait forward and allows on-site tuning for actual industrial systems. The algorithm is applied to a basic reluctance motor control, using simulations, which attest that the proposed tuning method is effective for this system.

A NEW CONCEPT ON AUTOMATIC PARKING OF AN ELECTRIC VEHICLE

C. Camus^(a); P. Coelho^(a); J.C.Quadrado^(a)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa;

Publicado em: Proceedings of the 6th WSEAS International Multiconference on Circuits, Systems, Communications and Computers (CSCC 2002), ISBN 960-8052-64-5 pp. 232-237, Rethymon, July 2002.

Resumo:A solution to perform an automatic parking manoeuvre for an electric vehicle is presented in this paper. A mathematical dynamic model is described considering the initial and final position of the vehicle in each point of the desired trajectory controlled by the vehicle's velocity and steering angle. The problem of obstacle detection is also considered to avoid collision and a discrete trajectory generation is formulated based on the initial and destination position of the vehicle.

AUTOMATIC SELF-PRODUCTION POWER SYSTEM

P. M. Fonte^(a); V.M.F. Mendes^(a); J.C. Quadrado^(a)

^(a)Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: Proc. of 6th WSEAS /CSCC International Multiconference in Circuits, Systems, Computers and Communications, "Recent Advances in Computers, Computing and Communications", WSEAS Press Post-Conference Book, páginas 38-44, 7, July 2002.

Resumo:We start by stating a mathematical programming problem for the optimisation of the operation of an automatic self-production power system. We discuss the optimisation problem in order to design an algorithm for our self-production power system. We present a case studied based in a real prices from Portuguese power market. Finally, we

report that our approach displays good results for a small self production prototype.

PROGRESS ON HIGH-VOLTAGE PULSE GENERATORS, USING LOW VOLTAGE SEMICONDUCTORS (<1KV), DESIGNED FOR PLASMA IMMERSION ION IMPLANTATION (PIII).

Luis Redondo^(a); N. Pinhão; Elmano Margato^(a); José Fernando Silva^(b);

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

Publicado em: Surface and Coatings Technology, vol. 156/1-3, pp. 61-65, July 2002.

Resumo: A conceptual new high-voltage pulse generator (HVPG) is under development for near future use in a PIII facility. This work shows the first results of the HVPG delivering up to 20kV/1A pulses, 5 μ s duration and 10kHz frequency, to the sample holding structure, surrounded by plasma, obtained from a very small vacuum chamber (1 litre) with DC plasma generation. The HVPG developed, based on solid state and step-up transformer technology, has an innovative modular design, which allows several dozens of kV with 5kV basic modules, each one containing only low voltage semiconductors (<1kV) and low insulation output transformers. These step-up transformers have a special winding design, which reduces parasitic elements. To further reduce the leakage flux, step-up transformers are fitted with two auxiliary windings.

VOLTAGE REGULATION SYSTEM DESIGN FOR THE VOLTAGE CONVERTER WITH SPLIT DC LINK CAPACITOR

Vasco Soares^{(a)(b)}, Pedro Verdelho^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico – Centro de Automática da UTL

Publicado em: IEEE - ISIE'02 “2002 IEEE-IES International Symposium on Industrial Electronics”, vol.4, pág.1091-1096, ISBN 0-7803-7369-3, ISBN0 -7803-7370 -7 (CD-ROM).

Resumo: This paper presents the voltage regulation system design for the four-wire voltage converter with split dc link capacitor. The voltage regulation system is used to control the dc side voltages on a three-leg voltage source converter connected to the ac mains. It accomplishes the total dc voltage regulation and voltage sharing across capacitors. System modelling and compensators syntheses are realized and presented. Simulation and experimental results are shown enabling to highlight the behaviour and robustness of the control systems proposed.

ELECTRIC MACHINES TEST BENCH AS CONTRIBUTION FOR THE STUDY OF AUTOMOBILE ELECTRICAL ACTIVE SUSPENSION SYSTEM

P. Gamboa^(a), E. Margato^(a), I. Martins^(b), J. Esteves^(c)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Escola Superior de Tecnologia–Universidade do Algarve;

^(c) Instituto Superior Técnico

Publicado em: Proceedings of 7th International Conference on Modeling and Simulation of Electric Machines, Converters and Systems, Montreal, Canada 2002.

Resumo: The primary function of vehicle suspension is to isolate the vehicle body and passengers from the oscillations created by the road irregularities and produce a continuous road-wheel contact assuring security. Typically, current automobiles use passive suspensions where performance is reasonable but oscillations are only reduced. An alternative is to use active suspensions; however, due to the cost and energy consumption, it is only used in top models from cars manufacturers. Use of electromagnetic actuators can be a solution for solving the problem: to use linear electromagnetic actuators applied directly in the system or to use a rotating electric machine with a rotation transformation into linear movement. As a first approach to the implementation of this last alternative, a classical test bench with two electric drives was used (one drive simulating the actuator system in test and the other actuating as disturbance element) allowing to implement a position controller able to answer to the disturbance torque for different control algorithms, that after could be implemented in the vehicle electromagnetic suspension system.

ELECTROGEOMETRIC MODEL SIMULATION FOR LIGHTNING PROTECTION SYSTEMS

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

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Publicado em: Actas da “10th International Power Electronics and Motion Control Conference – EPE PEMC”, Cavtat & Dubrovnik, Croatia, September 2002.

Resumo: This work proposes a computer program – the SPDA 2002–based on IEC 61662, ENV 61024-1 and AutoCAD 2000®. The SPDA 2002 is used by students of Electrotechnic Engineering, at Superior Institute of Engineering of Lisbon (ISEL), helping them to evaluate the risk of damages on buildings, simulating the electrogeometric model and designing the proper lightning protection system.

DSP IMPLEMENTATION OF A NEUTRAL CURRENT COMPENSATOR

Vasco Soares^{(a)(b)}, Pedro Verdelho^(b)

^(a) Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^(b) Instituto Superior Técnico – Centro de Automática da UTL

Publicado em: IEEE-ICHQP'02 “10th IEEE International Conference on Harmonics and Quality of Power”, ISBN 0-7803-7672-2 (CD-ROM)

Resumo: This paper presents an implementation of a neutral current compensator. The DSP based control circuit is applied to a four-wire voltage source converter with split dc link capacitor. Its aim is to compensate the neutral current and thus the zero sequence currents derived from harmonics and first harmonic unbalance. Neutral current compensation and dc voltage regulation system are analysed. Simulation and experimental results are presented enabling to highlight the system robustness and neutral current compensation effectiveness.

ELECTRICAL SIMULATION OF A p-i-n IMAGE SENSOR

J. Martins; M. Fernandes; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Vacuum*, vol. 64(3-4), pp. 307-313, Elsevier Science LTD, Oxford, IDS Number: 510HH, ISSN: 0042-207X, January, 2002.

We have modelled a p-i-n image sensor under local illumination through a two-dimensional non-linear circuit. The sensor is described as an array of photodiodes interconnected through lateral resistors, which model the sheet resistance of the doped layers. Under small-signal analysis a current-controlled resistor proportional to the inverse of the photocurrent models each photodiode. A SPICE based simulator is used as a tool to analyse the sensor output characteristics. Several configurations and contact geometries are analysed for the image transducer. The image responsivity, the spatial resolution and the image distortion are modelled by changing the ratio between the transversal and the lateral resistors or the acquisition points. Results show that the geometry and location of the contacts affect the distortion of the restored image. The conductivity of the doped layers and the light flux illumination influences the image resolution and accuracy. The simulated and experimental results were found in a good agreement.

PROPERTIES OF HIGH GROWTH RATE AMORPHOUS SILICON DEPOSITED BY MC-RF-PECVD

G. Lavareda^a; CN de Carvalho^a; A. Amaral^{a,c}; JP Conde^d; M. Vieira^e; V. Chu^f

^aUTL, Centro de Física Molecular, IST, Lisboa, Portugal; ^bUniversidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia; ^cUTL, DF, Lisboa, Portugal; ^dUTL, DEM, IST, Lisboa, Portugal; ^eInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^fInstituto Engenharia de Sistemas e Computadores, Lisboa, Portugal.

Publicado em: *Vacuum*, vol. 64(3-4), pp. 245-248, Elsevier Science LTD, Oxford, IDS Number: 510HH, ISSN: 0042-207X, January, 2002.

Hydrogenated amorphous silicon (a-Si 11) thin films have been deposited on glass and crystalline silicon substrates by magnetically confined RF-PECVD (MC-RF-PECVD) at different RF power densities in order to verify the influence of this deposition parameter on the density of states (DOS) and growth rate (R-G). It was found that the highest growth rate, 7.8 Angstrom/s, is obtained for a-Si:H films deposited with an RF power density of 14.3 mW/cm^3 . For the DOS calculation, constant photocurrent method (CPM) data have been used. The lowest value of DOS is approximately $8 \times 10^{15} \text{ eV/cm}^3$ and was obtained for a-Si:H films produced with an RF power density in the range of $10\text{-}20 \text{ mW/cm}^3$. Infrared spectroscopy shows that when the RF power density increases, the concentration of SiH₃ groups decreases and the concentration of SiH groups increases. At 8 mW/cm^3 , a maximum of the SiH₂ concentration is obtained. At this point, a maximum of the optical gap (1.9 eV) is observed and a minimum of the dark conductivity is verified. We conclude that the best films are achieved in an RF power density range ($7.1\text{-}21.4 \text{ mW/cm}^3$) for which an increase of SiH and a decrease of both SiH₂ and SiH₃ are simultaneously obtained. Thereafter, for higher power densities, an inversion of DOS and growth rate behaviour are observed due to ion bombardment.

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 Solids*, vol. 403-404, pp. 354-358, Elsevier Science SA, Lausanne, IDS Number: 525DQ, ISSN:0040-6090, February, 2002.

This paper presents a 1-D numerical simulation of the charge carrier transport and photogeneration in a-Si:H based p-i-n homo- and heterostructures. These structures with a special doping profile are used as the sensing element in Laser Scanned Photodiode image sensors. The effect of the carbon contents and doping profile on the junction characteristics are investigated and correlated with experimental data. Results show that the image sensitivity can be improved by increasing the doping level in the front p-layer and keeping the conductivity of the

back n-layer in the range 10^{-10} – 10^{-12} $\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$. The highest image sensitivity is achieved when a wide-gap a-SiC:H alloy is used as interface material since the electron density in the back layer can be reduced down to the free carrier concentration in the a-Si:H i-layer. Detailed simulation studies have been carried out at different light intensities and bias voltage. The band diagrams, electric field distribution, free carrier population, generation-recombination profiles, and electron and hole current densities are analysed. Results show that as the light intensity increases the potential drop across the a-SiC:H back layer becomes dominant leading to a significant change in the drift-diffusion balance along the i-layer. In the homojunction even at high light fluxes the transport process remains drift dominated.

MEMORY EFFECTS IN HIGHLY RESISTIVE p-i-n HETEROJUNCTIONS FOR OPTICAL APPLICATIONS

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

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bDepartamento de Física, IST, Portugal; ^cInstitut für Physikalische Elektronik, IPE, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Thin Film Solids*, vol. 403-404, pp. 363-367, Elsevier Science SA, Lausanne, IDS Number: 525DQ, ISSN: 0040-6090, February, 2002.

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-(Si_xC_{1-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.

SURFACE-BARRIER ITO/SiO_x/Si OPTICAL SENSOR WITH INTERNAL GAIN

M. Fernandes^a; A. Fantoni^a; Y. Vygranenko^a; R.Schwarz^a; M.Vieira^a; C. Nunes Carvalho^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCFM/UTL, Lisboa, Portugal.

Publicado em: *Vacuum*, vol. 65(1), pp. 67-71, Elsevier Science LTD, Oxford, IDS Number: 525ET, ISSN: 0042-207X, February, 2002.

Indium-tin-oxide (ITO)/SiO_x/n-Si/metal structures have been fabricated in order to develop a low temperature processing technique for production of high quantum efficiency and low-cost photodiodes. High-quality ITO film was deposited by reactive thermal evaporation at a low substrate temperature ($383\text{ K} < T_s < 473\text{ K}$) and acts as an effective collector of the photo-generated carriers and antireflection layer, simultaneously. The junction properties and carrier transport are investigated from dark and illuminated current-voltage and capacitance-voltage characteristics. A significant photocurrent amplification has been observed under reverse bias conditions in the photodiodes having high-resistivity substrate ($\rho \approx 10^3\ \Omega\text{-cm}$). Sensitivities up to 30 A/W were reached at $\lambda = 0.63\ \mu\text{m}$. The photocurrent amplification effect is attained only when both reverse bias voltage and radiation flux overcomes the threshold values.

LASER SCANNED PHOTODIODES (LSP) FOR IMAGE SENSING

M. Vieira^a; M. Fernandes^a; Y. Vygranenko^a; P. Louro^a; R. Schwarz^a; M. Schubert^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstitut für Physikalische Elektronik, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Sensors and Actuators A-Physical*, vol. 97-98, pp. 98-103, Elsevier Science SA, Lausanne, IDS Number: 564CG, ISSN: 0924-4247, April, 2002.

An optimized ZnO:Al/a-pin SixC_{1-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 rate of two orders of magnitude, a sensitivity of 6 mA/W and a responsivity of $17 \text{ } \Omega\text{Wcm}^{-2}$ 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 size of the spot limits the resolution due to the cross-talk between dark and illuminated regions leading to blurring effects.

BIOMETRIC SYSTEM BASED ON ONE SINGLE LARGE AREA a-SiC:H p-i-n PHOTODIODE

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Material Research Society Symposium, MRS Conference, S. Francisco, USA, April, 2002.*

Based on the Laser Scanned Photodiode (LSP) image sensor we present an optical fingerprint reader for biometric authentication. The device configuration and the scanning system are optimised for this specific purpose. A laser light illuminates the fingerprint placed on a glass surface in front of the capture device. The reflected light coming from the glass is projected onto the active surface of the sensing element (large area a-SiC:H p-i-n photodiode). The image is converted directly into a proportional electric current using the LSP as fingerprint reader. In this work the main emphasis will be put on the influence of the doped layers (doping level, carbon content) of the active layer (photosensitivity, defect density, temperature dependence, thickness) on the device performance (transfer functions, sensitivity, dynamic range, resolution, linearity, responsivity, response time). The scanning technique for fingerprint acquisition will be improved and the effects of the probe beam size, wavelength and flux, the scan time and modulation frequency on image contrast and resolution will be analysed under different electrical bias. An optical model of the image acquisition process is presented and

supported by a two dimensional simulation. Results show that a trade-off between read-out parameters (fingerprint scanner) and the biometric sensing element structure (p-i-n structure) are needed to minimize the cross talk between the fingerprint ridges and the fingerprint valleys. The performance of the capture device is enhanced by a tight control of image brightness and applied electrical bias. In the heterostructures with wide band gap/low conductivity doped layers the user-specific information is detected with a good contrast while the resolution of the sensor is around 20 μm . A further increase in the contrast is achieved by slightly reverse biasing the sensor with a sensitivity of 6.5 μWcm^{-2} and a flux range of two orders of magnitude.

DYNAMIC RESPONSE OF NON-PIXELED AMORPHOUS SILICON BASED IMAGE SENSORS

M. Fernandes; Y. Vygranenko; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Material Research Society Symposium, MRS Conference, S. Francisco, USA, April, 2002.*

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 sensor active area and recording the photoresponse in each scanning position. This work is focused on the analysis of the dynamic behavior of this type of sensor and to infer some sensor parameters like maximum scanning speed, from which depends the maximum achievable frame rate. In order to evaluate the sensor response to a time varying light excitation the sensor was locally illuminated with a focused chopped light source and the generated photocurrent was measured under different load conditions. Results show that the sensor is mainly capacitive and a signal rise time of approximately 100 μs was measured under a 1 $\text{k}\Omega$ load. Capacitance-Voltage measurements were also performed in order to evaluate the change in capacitance with uniform illumination. A model for the sensor was created from the experimental data and this model was used to simulate the dynamic behavior of the sensor. The simulation results obtained are in good

agreement with the experimental ones. As conclusion one can expect a trade off between the frame rate and the number of pixels. A frame rate higher than 10 fps was achieved for 100×100 pixels readout without a significant degradation in the image quality.

A NEW CLSP SENSOR FOR IMAGE RECOGNITION AND COLOR SEPARATION

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Material Research Society Symposium, MRS Conference, S. Francisco, USA, April, 2002.*

Large area p-i-n a-SiC:H heterostructures are used as LSP color sensors. For reading out the color signals, three appropriated voltages have to be successively applied in order to combine afterwards the information to yield a color image. The highly resistive and wide band gap doped layers confine the photogenerated carriers at the illuminated regions and driven by the scanner extract information on the image range and intensity. The forward bias controls the absorption and the electric field across the main generation region. As the applied bias increases the reversed electrical field in the bulk shifts toward the main generation regions, and successively suppresses the ac component of the photocurrent at each primary color allowing color extraction. The device performance is analyzed and the scanning technique for color separation improved. The effects of the bias on image contrast, resolution and color extraction are discussed. A physical model for image and color recognition is presented and supported by a two dimensional simulation.

PHOTOCARRIER RESPONSE TIME SCANNER

R. Schwarz^{a,b}; M. Fernandes^a; A. Fantoni^a; M. Vieira^a; P. Ferreira^b; P. Sanguino^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bPhysics Department, Instituto Superior Técnico, Portugal.

Publicado em: *J. Non Crystalline Solids, vol. 299, pp. 1261-1266, Part B, Elsevier Science BV, Amsterdam, IDS Number: 554VJ, ISSN: 0022-3093, April, 2002.*

We have used the dependence of the response time after short laser pulses on background light intensity in hydrogenated microcrystalline silicon to study some preliminary properties of a 2-D image sensor application. The 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.

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; M. Schubert^c

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstitut für Physikalische Elektronik, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Sensors and Actuators A-Physical*, vol. 97-98, pp. 221-226, Elsevier Science SA, Lausanne, IDS Number: 564CG, ISSN: 0924-4247, April, 2002.

A series of large area single layers and glass/ZnO:Al/p (Si_xC_{1-x}:H)/i (Si:H)/n (Si_xC_{1-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 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 series resistances around 10⁶ Ω 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 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.

IMAGE CAPTURE DEVICES BASED ON p-i-n SILICON CARBIDES FOR BIOMETRICS APPLICATIONS

M. Vieira^a; M. Fernandes^a; P. Louro^a; Y. Vygranenko^a; A. Fantoni^a; R. Schwarz^a; M. Schubert^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstitut für Physikalische Elektronik, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Journal of Non Crystalline Solids*, vol. 299, pp. 1245-1249, Part B, Elsevier Science BV, Amsterdam, IDS Number: 554VJ, ISSN: 0022-3093, April, 2002.

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 μWcm^{-2} were obtained under reverse voltage.

ANALYSIS OF THE BIAS DEPENDENT SPECTRAL RESPONSE OF a-SiC:H p-i-n PHOTODIODE

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Material Research Society Symposium, MRS Conference, S. Francisco, USA, April, 2002.*

Up to now the physics of amorphous hydrogenated silicon-carbon p-i-n heterostructures is not completely understood. Experimental analysis combined with comprehensive numerical simulation are the tools used to develop a physical model for the dominant transport mechanism inside

the heterostructures. To achieve unambiguous results it is useful to concentrate on peculiarities of the device, such as the bias voltage dependent spectral response and the current–voltage (I-V) characteristics under different light bias conditions. A series of large area single layers and heterojunction cells in the assembly glass/ZnO:Al/p ($\text{Si}_x\text{C}_{1-x}\text{:H}$)/i (Si:H)/n ($\text{Si}_x\text{C}_{1-x}\text{:H}$)/Al ($0 < x < 1$) were produced by PE-CVD at low temperature. The structural and optoelectronic properties of the single layers were determined through infrared and visible spectroscopy, temperature-dependent conductivity and complemented by CPM measurements. Junction properties, carrier transport, photogeneration and collection efficiency are investigated from dark and illuminated current-voltage characteristics and spectral response measurements, with and without additional background illumination and under different light bias conditions. The bias voltage dependent spectral response (with and without bias light) and the I-V dependence has been simulated and compared to experimentally obtained values. Results show that in the heterostructures the bias voltage influences the field and the diffusion part of the photocurrent differently. The interchange between primary and secondary photocurrent (i. e. between generator and load device operation) is explained by the interaction of field- and diffusion components within the photocurrent. A field reversal that depends on the light bias conditions (wavelength and intensity) explains the photocurrent reversal. The field reversal leads to the collapse of the diode regime (primary photocurrent) launches surface recombination at the p-i and i-n interfaces leading to a double-injection regime (secondary photocurrent). Considerations about conduction band offsets, electrical field profiles and inversion layers will be taken into account to explain the optical and voltage bias dependence of the spectral response.

DEPENDENCE OF THE LATERAL PHOTOEFFECT IN a-Si:H p-i-n STRUCTURES ON THE MATERIAL CHARACTERISTICS STUDIED BY MEANS OF A NUMERICAL SIMULATION

A. Fantoni; M. Fernandes; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Material Research Society Symposium, MRS Conference, S. Francisco, USA, April, 2002.*

When an a-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. Known as *lateral photo-effect*, this phenomena depends on the incident light wavelength, light intensity and on the applied bias. Anyway, its intensity can be, depending on the foreseen application, alternatively enhanced or reduced by correct device engineering. We have used the 2D numerical simulator ASCA to analyze the behavior of a-Si:H p-i-n structures under local illumination with the goal of observing the appearance of the lateral components of the electric field and current density vectors. The dependence of the lateral potential redistribution on the doping density, density of defects in the intrinsic layer, and layer thickness have been analyzed. This study aims to show how material properties and device geometry can be combined in order to control the lateral photo-effect.

RECUPERAÇÃO DE INFORMAÇÃO EM VOIP

Carlos Eduardo de Meneses Ribeiro

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Este artigo compara duas estratégias para recuperação ou disfarce da informação de sinais de fala, de pacotes perdidos em ligações IP. Uma dessas estratégias emprega predição de longa duração, já proposta no apêndice 1 da recomendação G.711 do ITU-T, que data de 1999. É agora proposta outra estratégia, utilizando um preditor de curta duração e entrelaçamento entre amostras, que diminui a probabilidade de perda de amostras consecutivas, embora aumentando a complexidade e atraso. Esta probabilidade é ainda diminuída desde que haja possibilidade de colocar na rede pacotes com prioridades diferentes. Garantindo a chegada ao receptor de amostras suficientemente próximas, pode-se tirar partido

da grande correlação entre amostras consecutivas para extrapolar a informação em falta.

SENSORES DE IMAGEM BASEADOS EM HETEROESTRUTURAS DE SILÍCIO/CARBONO p-i-n PARA APLICAÇÕES BIOMÉTRICAS

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Este trabalho descreve a optimização do sensor de imagem “Laser Scanned Photodiode” LSP, para utilização como leitor biométrico de impressões digitais. Um raio laser ilumina a impressão digital sobre uma superfície de vidro colocada na parte frontal do sensor. A luz reflectida pelo vidro é projectada sobre a superfície activa e a imagem é convertida num sinal eléctrico pelo sensor LSP. Os resultados mostram que é necessário um compromisso entre os parâmetros do sistema de leitura por varrimento e a estrutura utilizada como sensor biométrico, de modo a minimizar a interferência (cross-talk) entre as rugas (regiões escuras) e os vales (zonas claras) da impressão digital. Na configuração optimizada e sob polarização inversa a informação específica de cada impressão digital apresenta um bom contraste, e a resolução espacial é aproximadamente 20 μm . A utilização de polarização inversa proporciona um aumento da sensibilidade claro/escuro, um aumento na gama dinâmica de cerca de duas ordens de grandeza e uma responsividade inferior a $65 \mu\text{Wcm}^{-2}$.

INFLUÊNCIA DA CONDUTIVIDADE DAS PELÍCULAS DOPADAS NA UTILIZAÇÃO DE ESTRUTURAS p-i-n COMO SENSORES DE IMAGEM (LSP)

P. Louro^a; M. Fernandes^a; Y. Vygranenko^a; R. Schwarz^a; M. Vieira^a; M. Schubert^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstitut für Physikalische Elektronik, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Neste trabalho utilizaram-se filmes finos amorfos de grande área e estruturas p-i-n do tipo vidro/ZnO:Al/p(Si_xC_{1-x}:H)/i(Si:H)/n(Si_xC_{1-x}:H)/Al ($0 < x < 1$) produzidos por deposição química por vapor assistida por plasma, a baixa temperatura. Realizou-se um estudo das propriedades das estruturas p-i-n, no que diz respeito ao transporte de portadores de carga e à fotogeração, através das características corrente-tensão e capacidade-tensão, no escuro e sob iluminação. Nas heterojunções, as curvas corrente tensão, sob iluminação, apresentam uma forma em S, o que se traduz por baixos da percentagem de área útil. A medida da resistência série conduziu igualmente a valores elevados, da ordem de $10^5 \Omega$. Uma simulação numérica permitiu igualmente compreender o mecanismo de transporte das estruturas. Os dados da simulação ajustam-se aos resultados medidos experimentalmente, sugerindo que o mecanismo de transporte no escuro depende essencialmente de deriva enquanto que sob iluminação é controlada principalmente pela difusão de portadores.

OPTIMIZAÇÃO DO SISTEMA DE AQUISIÇÃO PARA SENSORES DE IMAGEM LSP

M. Fernandes; M. Vieira; J. Martins; P. Louro; A. Maçarico; R. Schwarz

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Este trabalho propõe melhorar a prestação de sistemas baseados em sensores de imagem de grande área do tipo *Laser Scanned Photodiode* (LSP) através da optimização dos parâmetros de aquisição de sinal, tais como a intensidade e secção do feixe de varrimento, tempo de aquisição e condições de polarização. A resposta do sensor e a relação sinal ruído está relacionada com parâmetros básicos como a intensidade da imagem, intensidade do feixe de varrimento e polarização. Os resultados mostram que a resolução que o sensor pode atingir está directamente relacionada com as características do dispositivo e na prática é limitada pelo tempo de aquisição. O diâmetro do feixe de varrimento limita a resolução devido à sobreposição de zonas claras e escuras, levando a um efeito de esborratamento na imagem final, e a uma conseqüente diminuição da

resolução. A resposta do sensor é limitada pela resistência de carga, que para velocidades de varrimento altas deve ser mantida em valores baixos.

SIMULAÇÃO ELECTRÓNICA DE UM SENSOR DE IMAGEM BASEADO EM DISPOSITIVOS p-i-n

J. Martins; M. Fernandes; M. Vieira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Um sensor de imagem baseado num dispositivo p-i-n sob iluminação local é modelado por uma estrutura não linear em que o elemento activo do sensor é descrito por uma matriz de duas dimensões de fotodíodos interligados através de resistências laterais. A estrutura do sensor inclui contactos frontais e posteriores utilizados como interface eléctrica. A imagem é constituída por uma luz estacionária projectada numa localização fixa na superfície fotosensível. O processo de aquisição da imagem inclui a medição do valor da fotocorrente induzida por um feixe de luz modulada de pequena intensidade que varre a superfície do sensor. A análise das características de saída do sensor é efectuada com recurso a uma ferramenta de simulação baseada no programa SPICE, através da alteração de alguns parâmetros no circuito a simular. Os resultados obtidos demonstram que a geometria e a localização dos contactos afectam a distorção da imagem recuperada. A condutividade das camadas dopadas e a intensidade do fluxo de luz de iluminação influenciam a resolução e a correcção da imagem. Os resultados de simulação e os resultados experimentais apresentam uma boa concordância.

CONFIGURAÇÃO ELÉCTRICA INTERNA DE CÉLULAS SOLARES DE SILÍCIO AMORFO DE TIPO p-i-n: A IMPORTÂNCIA DA CAMADA INTRÍNSECA ESTUDADA ATRAVÉS DE UMA SIMULAÇÃO NUMÉRICA

A. Fantoni

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Este trabalho propõe-se estudar o comportamento eléctrico interno de células solares de silício amorfo de tipo p-i-n. A importância da camada intrínseca será estudada através do programa de simulação numérica ASCA; parâmetros como a sua espessura e a densidade de defeitos são postos em relação com a distribuição interna do potencial, do campo eléctrico, de portadores de carga eléctrica e da taxa de recombinação em condições de diferente iluminação (luz monocromática, branca, e de diferente intensidade) e de tensão aplicada. As propriedades macroscópicas da célula solar (representadas pela característica corrente-tensão em termos de factor de forma, corrente de circuito fechado, potencial de circuito aberto e eficiência de conversão energética) podem ser relacionadas com as características da camada intrínseca e explicadas através do modelo de transporte tipo difusão-deriva em conjunto com o modelo de recombinação Shokley-Read-Hall. Os resultados apresentados permitem enfatizar as diferentes contribuições das componentes de deriva e de difusão na fotocorrente colectada. Será possível desta maneira estabelecer a configuração óptima da célula, e atingir o máximo rendimento expectável do dispositivo em função da espessura e qualidade da camada intrínseca.

PHOTOCONDUCTIVITY STUDIES OF $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}/\text{GaN}$ SINGLE HETEROSTRUCTURES

M. Niehus^{a,b}; S. Koynov^b; P. Sanguino^b; M. Heuken^c; B. K. Meyer^d; R. Schwarz^{a,b}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bDept. Física, Instituto Superior Técnico, Portugal; ^cAIXTRON, Aachen, Germany; ^dl. Physics, University of Giessen, Germany.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

We present spectral photoconductivity (SPC) and transient photoconductivity (TPC) studies in a $\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}/\text{GaN}$ single heterostructure. We attribute near bandgap peaks in the SPC between 300 K and 500 K to a deep trap-conduction band transition. The trap distribution lies approximately 100 meV above the valence band edge, for both GaN and AlGaN layer. In TPC studies we show that charge

buildup after strong pulsed laser excitation can be detected by anomalous photocurrent decay.

TRANSPORT PROPERTIES OF STRONGLY DISORDERED MAGNETIC SEMICONDUCTORS AND THIN MAGNETIC LAYERS

V. K. Dugaev

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

We discuss a theory of the low-temperature transport properties of strongly disordered magnetic semiconductors and metallic ferromagnets. Quantum corrections, caused by electron localisation and the electron-electron interaction, control the dependence of the resistivity on temperature and magnetic field. We analyse the localisation-induced charge and spin conductivity, the anomalous Hall effect and their dependence on magnetic doping. The role of the spin-orbit interaction and the effective dimensionality of the structure is discussed.

SIMULATING INCOMPLETE INFORMATION EXCHANGE AMONG SOFTWARE AGENTS

Paulo T. Silva; Porfirio Filipe

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

The paper presents a communication layer, fitted to simulate incomplete information exchange among software agents inhabiting a simulation environment. Communication layer is designed to ensure simulation repeatability at the message exchange level. Message exchange impact on repeatability is found to have some addressable open issues within RoboCup-Rescue simulation environment's present stage. The RoboCup-Rescue simulation environment architectural model is considered. This model considers multiple heterogeneous software agents

and several domain specific aspect simulators. In this model, a set of communicative acts sustains all inter-agent information exchange as well as agent world acting and sensing capabilities. It is assumed that agent's information exchange model, follows a connectionless simple request reply communication pattern. A reliable UDP-based protocol, less resource demanding than TCP, is proposed. Incomplete information exchange is regarded as a nonfunctional facet. Knowledge of the environment communicative acts is introduced at the communication layer, so that application level independency is achieved on that nonfunctional facet. To illustrate usage of the proposed mechanism, RoboCup-Rescue simulation environment is used and the layer presented in this paper plugged into that model. A domain specific aspect simulator supporting run time changeable message corruption rate is depicted.

O PROJECTO OCTOPUS: O MÓDULO RECONHECEDOR DE ZONAS OXIDADAS

Rodolfo Oliveira^b; HJ Pinheiro-Pita^{a,b}; Fernando Coito^{b,c}; A. Steiger-Garção^{b,c}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bUNINOVA – Instituto de Desenvolvimento de Novas Tecnologias; ^cUniversidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

O projecto OCTOPUS – “Remote Control Maintenance of Ship’s Hull and Topside” foi um projecto Brite-Euram com o n.º BE97-4385, concluído em Agosto de 2001. A parceria foi composta pela empresa francesa Cybernertix (que coordenava), pelas instituições italianas ICO, RGI e pelas instituições portuguesas UNINOVA e LISNAVE. No presente artigo é apresentado o módulo de reconhecimento de zonas oxidadas, da responsabilidade do UNINOVA. Na primeira implementação deste módulo a solução passava pela implementação de um classificador baseado no modelo CMYK de cor, recorrendo à Teoria dos Conjuntos Difusos – CLASSFUZ. Embora a solução encontrada desempenhasse com sucesso a sua tarefa na maioria das situações, obrigava à existência de uma biblioteca de conjuntos de distribuição de probabilidade para cada situação específica tinta/oxidação. Neste artigo discute-se uma segunda implementação do classificador baseado numa rede neuronal de percepções com retro-propagação. O novo classificador

utiliza informação fornecida pelo classificador baseado em conjuntos difusos – CLASSFUZ. No fim apresenta-se a solução encontrada para a integração deste módulo no sistema OCTOPUS.

ANÁLISE DE DADOS SOBRE AUDIMETRIA DA TELEVISÃO EM PORTUGAL

Nuno Datia^a; HJ Pinheiro-Pita^{a,b}; Carlos Leandro^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bUNINOVA – Instituto de Desenvolvimento de Novas Tecnologias.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Nos últimos 30 anos tem-se assistido a um rápido desenvolvimento de técnicas de aprendizagem automática, por exemplo, para classificação e para agrupamento (*clustering*). A área do KDD – Descoberta de Conhecimento a partir de Bases de Dados, tem por objectivo a aplicação destas técnicas sobre grandes volumes de informação. Este artigo descreve uma primeira proposta de um sistema capaz de prever as audiências dos quatro canais de televisão portugueses a funcionar em antena aberta. Um sistema com estas características é uma ferramenta importante no suporte à decisão, não só para especialistas em grelhas de televisão, como também para publicitários e anunciantes. Assim, partindo dos dados recolhidos durante dois anos por uma empresa de audimetria a operar em Portugal, contendo registos diários de 1800 indivíduos (minuto a minuto), distribuídos por 600 famílias, representando uma população de 8,9 milhões de telespectadores em 3 milhões de habitações e dos ficheiros contendo as grelhas de programação desses canais, desenvolveu-se o trabalho a seguir apresentado.

CLASSIFICADOR DE POEMAS

Paulo A. Araújo^a; Nuno J. Mamede^b

^aL2F/Instituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bL2F/Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Descreve-se um classificador para poemas da poética portuguesa. A classificação dos poemas é realizada com base nos conceitos de estrofe, verso, sílaba e rima definidos no dicionário de termos literários e no dicionário de literatura. Foi implementado um conjunto de regras que tem em conta o número de versos por estrofe, o número de sílabas de cada verso e a rima utilizada. O protótipo desenvolvido agrega um módulo que contém o léxico, um módulo que realiza a interface com uma aplicação externa que gera transcrições fonéticas e gera divisões silábicas das palavras, e 3 módulos funcionais. São utilizadas técnicas de processamento da língua natural para realizar a correcção ortográfica do poema, tendo também sido desenvolvidos algoritmos para classificar os poemas. É feita uma avaliação do protótipo descrito, utilizando diferentes tipos de poemas. Por último são apresentadas algumas conclusões relativamente às potencialidades e limitações do classificador descrito.

SERVIÇOS E AGENTES EM SISTEMAS DE INFORMAÇÃO: UMA PERSPECTIVA INTEGRADORA

L. Morgado; A. Teófilo

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Neste artigo é discutido o interesse das abordagens baseadas em agentes como meio de lidar com a crescente complexidade dos sistemas de informação, bem como a forma como essas abordagens poderão ser integradas com os paradigmas e tecnologias actuais, em particular com as abordagens baseadas em serviços. Nesse sentido, é proposto um modelo de agente que permite essa integração através da definição das capacidades de um agente em termos de serviços disponíveis, sobre os quais o agente pode raciocinar no sentido de atingir os respectivos objectivos.

POTENCIAÇÃO MODULAR EM ARQUITECTURAS COM EXTENSÕES SIMD

Pedro Félix; João Belo

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Considera-se a optimização da potenciação modular no contexto de operações criptográficas. Trata-se a sua adequação a arquitecturas com extensões SIMD e a organizações *superpipelined*. Identifica-se paralelismo na operação de potenciação modular. Apresentam-se formas de vectorização e paralelização da multiplicação de Montgomery e propõem-se três algoritmos. Avalia-se o desempenho destes no processador *Pentium 4*.

UMA NOVA ABORDAGEM AO ENSINO INTRODUTÓRIO DA PROGRAMAÇÃO USANDO JAVASCRIPT/HTML

Jorge Martins; Luís Falcão; Pedro Félix; Pedro Pereira

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Apresenta-se nesta comunicação uma nova abordagem no ensino introdutório da programação, usando a linguagem JavaScript no contexto de documentos HTML. Tem-se por objectivo melhorar o rendimento do processo de ensino/aprendizagem, aumentando a motivação dos alunos e reduzindo a complexidade marginal, introduzida pelas linguagens classicamente usadas para este efeito. Elencam-se os temas abordados, indicando a ênfase e exemplos utilizados. Compara-se a abordagem adoptada com outras existentes, nomeadamente as baseadas na utilização da linguagem Java.

DETECTOR DE RADAR NA BANDA X

Henrique Silva; Fernando Fortes

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Esta comunicação descreve o enquadramento, projecto, implementação e teste dum sistema de detecção de Radares Marítimos a operar na banda X. Trata-se dum trabalho multidisciplinar, pois envolve o estudo de antenas impressas, electrónica de microondas, electrónica analógica e electrónica digital de processamento. Referem-se os bons resultados práticos e mostra-se ser possível a obtenção dum detector compacto, leve, de muito baixo custo de produção e baixo consumo.

SINCRONIZAÇÃO BASEADA NO MODELO DA DINÂMICA EMISSOR-RECEPTOR EM COMUNICAÇÃO MÓVEL

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

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Neste trabalho trata-se o problema da sincronização de portadora em cenários de comunicação rádio móvel onde, devido ao movimento relativo emissor-receptor, há variação significativa de fase durante o intervalo de símbolo. Formula-se a comunicação digital como problema de estimação recursiva, bayesiana, em canal afectado por ruído aditivo, branco, gaussiano. A variação de fase, devida ao movimento relativo, é modelada por um processo de Gauss-Markov de terceira ordem. A detecção símbolo a símbolo e o seguimento da fase, durante o intervalo de símbolo, são realizados por um banco de filtros estocásticos não-lineares e um algoritmo de decisão baseado no critério de máxima probabilidade *a posteriori*. Apresentam-se resultados de simulação, em cenários realistas, evidenciando a relevância dos algoritmos e da abordagem adoptada.

SEGUIMENTO DO CORPO HUMANO COM MODELOS ARTICULADOS BIDIMENSIONAIS

Rui M. Jesus^a; Arnaldo J. Abrantes^a; Jorge S. Marques^b

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Este trabalho tem como objectivo o seguimento dos movimentos de um corpo humano observado por uma câmara de vídeo. O seguimento do corpo humano é uma tarefa complexa devido à oclusão temporária de alguns segmentos do corpo durante o movimento, e à dificuldade em detectar com precisão pontos anatómicos na imagem sem usar marcas artificiais. Este artigo descreve um algoritmo de seguimento que evita a utilização destas marcas. O método proposto é baseado em três modelos: um modelo geométrico do corpo humano, um modelo de movimento que descreve a evolução dos parâmetros do modelo geométrico, e um modelo da aparência visual de cada segmento do corpo humano. O sistema proposto tem capacidade de aprender a partir de experiências anteriores e de melhorar o seu desempenho durante a operação de seguimento. Para ilustrar o desempenho do sistema de seguimento são apresentados resultados experimentais.

APOIO AO DIAGNÓSTICO MÉDICO BASEADO EM REDES BAYESIANAS

Isabel Milho^a; Ana Fred^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

O trabalho apresentado nesta comunicação consiste numa ferramenta para desenvolvimento de aplicações de diagnóstico médico, baseada em redes bayesianas. O sistema de apoio tem interface adequada ao desenho de aplicações de diagnóstico por especialistas do domínio clínico, sem que estes tenham conhecimentos profundos da teoria das redes bayesianas. Depois de desenhada a aplicação específica, a interacção com o especialista é feita via página de Internet (utilização habitual da aplicação). Considerando que a maioria dos modelos de diagnóstico médico tem uma estrutura simples, composta por relações causais doença-sintoma, o mecanismo de inferência implementado tira partido da estrutura do modelo simplificado, aliviando a complexidade

computacional. Apresenta-se um exemplo de aplicação para diagnóstico na área das doenças do sono, ilustrando a funcionalidade do sistema.

ESTIMAÇÃO DE VELOCIDADE DE ALVOS MÓVEIS EM RADAR DE ABERTURA SINTÉTICA USANDO DADOS SUB-AMOSTRADOS

Paulo Marques^a; José Dias^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica de Engenharia, ISEL, Maio, 2002.*

Apresenta-se uma estratégia inovadora para obtenção de estimativas de velocidade radial de alvos móveis cujas velocidades induzem deslocamentos em frequência superiores ao limite de Nyquist imposto pela frequência de repetição de impulso (*Pulse Repetition Frequency – PRF*). Usa-se o facto de o deslocamento em frequência na direcção de tempo-lento ser linearmente dependente da velocidade radial para cada frequência em tempo-rápido. Assim, o espectro bidimensional do eco proveniente dum alvo móvel exhibe um declive que depende da velocidade radial do objecto e que não está limitada pelo PRF. A metodologia proposta é avaliada usando dados simulados e dados reais.

BIOMETRIC SYSTEM BASED ON ONE SINGLE LARGE AREA a-SiC:H p-i-n PHOTODIODE

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of 1st IEEE International Conference on Sensors, Hyatt, Orlando, Kissimmee, Florida, USA, June, 2002.*

Based on the Laser Scanned Photodiode (LSP) image sensor we present an optical fingerprint reader for biometric authentication. The device configuration and the scanning system are optimized for this specific purpose. The scanning technique for fingerprint acquisition is improved and the effects of the probe beam size, wavelength and flux, the scan

frequency on image contrast and resolution will be analyzed under different electrical bias. An optical model of the image acquisition process is presented and supported by a two dimensional simulation. Results show that a trade-off between read-out parameters (fingerprint scanner) and the biometric sensing element structure (p-i-n structure) are needed to minimize the cross talk between the fingerprint ridges and the fingerprint valleys. In the heterostructures with wide band gap/low conductivity doped layers the user-specific information is detected with a good contrast while the resolution of the sensor is around 20 μm . A further increase in the contrast is achieved by slightly reverse biasing the sensor with a sensitivity of 6.5 μWcm^{-2} and a flux range of two orders of magnitude.

INFLUENCE OF THE INTRINSIC LAYER CHARACTERISTICS ON a-Si:H p-i-n SOLAR CELL PERFORMANCE ANALYSED BY MEANS OF A COMPUTER SIMULATION

Alessandro Fantoni^{a,b}; Manuela Vieira^a; Rodrigo Martins^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bFCT-UNL, Monte de Caparica, Portugal.

Publicado em: *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 73(2), pp. 151-162, Elsevier Science BV, Amsterdam, IDS Number: 558RE, ISSN: 0927-0248, June, 2002.

In this paper a set of one-dimensional simulations of a-Si:H p-i-n junctions under different illumination conditions and with different intrinsic layer are presented. The simulation program ASCA permits the analysis of the internal electrical behaviour of the cell allowing a comparison among the different internal configurations determined by a change in the input set. Results about the internal electric configuration will be presented and discussed outlining their influence on the current tension characteristic curve. Considerations about the drift-diffusion and the generation-recombination balance distributions, outlined by the simulation, can be used to explain the correlation between the basic device output, the i-layer characteristics (thickness and DOS), the incident radiation intensity and photon energy.

FERROMAGNETISM IN DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS AT LOW CARRIER DENSITY

V. K. Dugaev^{a,b}; V. I. Litvinov^b; J. Barnás^c; A. H. Slobodskyy^d; W. Dobrowolski^e; M. Vieira^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bWaveBand Corporation, Torrance, USA; ^cDept. of Physics, Adam Mickiewicz University, Poland and Inst. of Molecular Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland; ^dPhysikalisches Institut, Wurzburg, Germany; ^eInst. of Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland.

Publicado em: *Proceedings of the European Conference on Physics of Magnetism, Poznan, Poland, July, 2002.*

We present a general approach to the problem of a ferromagnetic phase transition in diluted magnetic semiconductors with free carriers. The Curie temperature of ferromagnetic transition is calculated in the mean field approximation. The approach allows to analyze the effects of magnetic fluctuations and disorder on the Curie temperature. We also propose a new mechanism of exchange interaction between magnetic impurities at vanishing concentration of free carriers.

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

Paulo Marques^a; José Dias^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *European Conference on Synthetic Aperture Radar, EUSAR 2002, Cologne, Germany, July.*

It is well known that a moving target induces a Doppler-shift and a Doppler-spread on the returned signal in the slow-time frequency domain. Most of the techniques proposed in recent literature take advantage of this knowledge to retrieve the moving target image and velocity parameters. The azimuth velocity of a moving target is the responsible for the spread in the slow-time frequency domain whereas the range velocity induces the Doppler-shift. Given a PRF, the Doppler-shift is confined to, $-PRF/2 < f_D < PRF/2$, where $f_D = 2\mathbf{n}_r/\mathbf{l}$ is the azimuth Doppler-shift induced by a moving target with range velocity \mathbf{n}_r , when the carrier wavelength is \mathbf{l} . If the signal is aliased (the induced Doppler-shift exceeds $PRF/2$) it has been generally accepted that the true

moving target range velocity cannot be uniquely determined using a single antenna and a single pulse scheduling. The traditional solution to resolve such targets consists in increasing the PRF, or alternatively, in using a non-uniform PRF. The increasing of the PRF leads to a decrease in the maximum unambiguous range swath, besides the huge memory requirements to store the received signal. The use of a non-uniform PRF needs a non-conventional pulse scheduling. Moreover, non-uniform sampling introduces higher complexity in image reconstruction. Using typical SAR mission parameters, a single sensor, and uniform pulse scheduling, we readily conclude that the maximum unambiguous range velocity is usually very small. The approach herein proposed to estimate the range velocity of moving targets with velocities above the maximum imposed by the PRF is based on the knowledge that the Doppler-shift in the azimuth spectra depends linearly on the radar fast-time frequency; i.e., the Doppler-shift varies with the wavenumber $k = 2\pi/\lambda$ proportionally to the true target range velocity. In the two dimensional frequency domain, a moving target return will exhibit a slope which is not subject to PRF limitations. We will present a methodology to retrieve the linear dependence of the Doppler-shift in the azimuth dimension with the fast-time frequency, thus computing an unaliased estimate of the moving target range velocity. The developed methodology is not intended to achieve high accuracy on the range velocity estimation. Rather, it is designed to retrieve the azimuth spectral support where the Doppler-shift belongs. This information is crucial to retrieve the range velocity with high accuracy. Experimental results using real data from the MSTAR public release data set will be presented.

INCOMPLETE INFORMATION EXCHANGE IN A SIMULATION ENVIRONMENT: A COMMUNICATION LAYER APPROACH

Paulo T. Silva^a; Porfírio Filipe^a; Helder Coelho^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bFaculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Departamento de Informática, Bloco C5, Piso 1, Campo Grande, 1749-016 Lisboa, Portugal.

Publicado em: *First International Joint Conference on Autonomous Agents and Multi-Agent Systems – AAMAS. Workshop on Regulated Agent Based Social Systems: Theories and Applications – RASTA, Bologna, Italy, July, 2002.*

The paper presents a communication layer, fitted to simulate incomplete information exchange among software agents inhabiting a simulation environment. The communication layer is designed to ensure simulation repeatability at the message exchange level. Message exchange impact on repeatability is found to have some addressable open issues within RoboCup-Rescue simulation environment's present stage. The RoboCup-Rescue simulation environment architectural model is considered. This model considers multiple heterogeneous software agents and several domain specific aspect simulators. In this model, a set of communicative acts sustains all inter-agent information exchange as well as agent-world acting and sensing capabilities. RoboCup-Rescue communicative acts are classified from the simulation repeatability perspective. It is assumed that agent's information exchange model, follows a connectionless simple request-reply communication pattern. A reliable UDP-based protocol, less resource demanding than TCP, is proposed. Incomplete information exchange is regarded as a nonfunctional facet. Knowledge of the environment communicative acts is introduced at the communication layer, so that application level independency is achieved on that nonfunctional facet. The paper describes the experiments and presents the results that validate the proposal of an UDP based reliable protocol. The RoboCup Rescue simulation environment is used to materialize and analyze the proposed classification of communicative acts.

TUNING THE SPECTRAL DISTRIBUTION OF p-i-n a-SiC:H DEVICES FOR COLOUR DETECTION

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Eurosensors XVI, European Conference on Solid-state Transducers, Praga, Czech Republic, September, 2002, in press.*

ZnO:Al/p (SiC:H)/i (Si:H)/n (SiC:H) large area image and colour transducers are analysed. Carrier transport and collection efficiency are investigated from dark and illuminated current-voltage dependence and spectral response measurements under different optical and electrical bias conditions. Results show that the carrier collection depends on the optical

bias and on the applied voltage. By changing the electrical bias around the open circuit voltage it is possible to filter the absorption at a given wavelength and so to tune the spectral sensitivity of the device. Transport and optical modelling give insight into the internal physical process and explain the bias control of the spectral response and the image and colour sensing properties of the devices.

NEW COLOUR AND IMAGE LASER SCANNED PHOTODIODE SENSOR

M. Fernandes; M. Vieira; P. Louro; A. Fantoni; J. Martins

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of Eurosensors XVI, European Conference on Solid-state Transducers, Praga, Czech Republic, September, 2002, in press.*

Large area p-i-n a-SiC:H heterostructures are used as LSP color sensors. For reading out the RGB color signals three forward appropriate voltages close to the open circuit conditions have to be successively applied in order to combine information to yield a color image. The high resistive SiC doped layers confine the photogenerated carriers at the different generation regions and driven by the scanner extract information on the image color and intensity. As the applied bias increases the reversed electrical field in the bulk shifts and successively suppresses the ac component of the photocurrent at each primary color allowing color extraction.

A MOBILE AGENTS APPROACH TO VIRTUAL LABORATORIES AND REMOTE SUPERVISION

L. M. Camarinha-Matos^a; Octavio Castolo^a; Walter Vieira^{b,a}

^aNew University of Lisbon, Faculty of Sciences and Technology, Quinta da Torre, 2829-516 Monte Caparica, Portugal; ^bInstituto Superior de Engenharia de Lisboa, DEETC, Portugal.

Publicado em: *Journal of Intelligent and Robotic Systems, vol. 35, pp. 1-22, issue 1, September, 2002.*

This paper presents the use of adaptive mobile agents for remote operation, enabling real-time response in spite of the limitations of the communication channels in terms of time-delays, availability, and reliability. Autonomy of the mobile agents is achieved through high levels of intelligence including execution monitoring and error recovery. Potential applications range from traditional telerobotics to virtual laboratories where mobile agents act as representatives of users in scientific experiments. Practical results are presented in a scenario where a SCARA-type robot is remotely commanded through the Internet.

ADAPTIVE CARRIER TRACKING IN MOBILE COMMUNICATION AN INNOVATIONS-BASED APPROACH

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

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the IEEE VTS 56th Vehicular Technology Conference, VTC 2002–Fall, vol. 4, pp. 2273-2277, Vancouver, September, 2002.*

In this paper we address the problem of mobile communication with highly accelerative emitter/receiver dynamics. Additive white Gaussian noise channel is assumed, and the relative motion is modelled as a vector Gauss-Markov process, from which only the first component is observed. The receiver consists of a bank of stochastic nonlinear filters and a decision algorithm driven by the filters innovations processes. In practice, to cope with any real trajectory, specially with maneuvers, an adaptive strategy has to be adopted. In the solution herein presented, the receiver commutes between two models (double integrated Brownian motions with different variance parameters), switching being determined by the symbol decision metrics, which is based on the filters innovations processes. This adaptive receiver has good carrier tracking capability with the corresponding performance in terms of bit error probability.

TRACKING THE HUMAN BODY USING MULTIPLE PREDICTORS

Rui M. Jesus^a; Arnaldo J. Abrantes^a; Jorge S. Marques^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto de Sistemas e Robótica, Instituto Superior Técnico.

Publicado em: *Second International Workshop on Articulated Motion and Deformable Objects, International Association for Pattern Recognition (IAPR), Palma de Maiorca, November, 2002.*

The objective of this work is to track the human body from a video sequence, assuming that the motion direction is parallel to the image plane. Tracking the human body is a difficult task because the human body may have unpredictable movements and it is difficult to accurately detect anatomic points in images without using artificial marks. Furthermore, self-occlusions often prevent the observation of some body segments. This paper describes a tracking algorithm, which avoids the use of artificial marks. The proposed system is able to learn from previous experience, and therefore its performance improves during the tracking operation. The ability of the tracking system to gradually adapt to a particular type of human motion is obtained by using on-line learning methods based on multi-predictors. These predictors are updated in a supervised way using information provided by a human operator. Typically, the human operator corrects the model estimates several times during the first few seconds, but the corrections rate decreases as time goes by. Experimental results are presented in the paper to illustrate the performance of the proposed tracking system.

EFFECTS OF MISMATCH ON CMOS MONOLITHIC MIXERS IMAGE REJECTION

Fernando Azevedo^{a,b}; M. João Rosário^{b,c}; J. Costa Freire^{b,c}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto de Telecomunicações; ^cInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *The 13th IEEE International Symposium on Personal Indoor and Mobile Radio Communications, vol. 5, pp. 2372-2376, Lisbon, September, 2002.*

For current PCS systems to have low cost terminals, the IC technology must be standard CMOS. One very important key-part in transceiver design that allows eliminating the off-chip discrete components, to fully integration, is the mixer. In the last few years some authors proposed several architecture solutions where one of them stands out, the wide-band intermediate frequency double conversion system. The wide-band

intermediate frequency (IF) architecture converts all the radio frequency (RF) spectrum passing through the input RF filter directly to base band (BB) as in the case of direct conversion. No band pass filtering is performed at IF. However in contrast to direct conversion, the translation takes place in two steps, using two local oscillators (LO) and two sets of mixers. This provides the following main advantages: no oscillator operates at the RF input frequency, and the tuning of the receiver can be accomplished using the second low frequency LO. The double balanced mixer presented in this publication is an image rejection converter that uses six single mixers to implement the above referred architecture. Each single mixer is implemented with CMOS Gilbert cells. If the branches I (in-phase) and Q (quadrature) are perfectly matched and the local oscillators are applied in quadrature the image is fully rejected on both I and Q outputs. Cancellation of AM LO noise and spurious responses, and port to port isolation is also obtained with this topology. Finally, circuit simulation results are developed and applied to the design of a monolithic CMOS mixer for wireless applications.

A DISTRIBUTED WEB-BASED K-12 MANAGEMENT SYSTEM

João Ferreira^a; Alberto Silva^b; Rui Azevedo^b; Gonçalo Borrêga^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto Superior Técnico; INESC-ID.

Publicado em: *E-Learn 2002, ISSN 1-880094-46-0, pp. 1455-1458, Association for the advancement of Computing in education (AACE), Montreal, Canada, October, 2002.*

The project “Rent@School – Bringing the Future to the Education” is a research effort to study and prototype information system architectures to support, standardize, and facilitate the management of K12 schools at a national scale. It looks for the sharing and dissemination of relevant information among different stakeholders, based on the ASP model and also on a novel architecture, which we called "distributed and multi-instance web architecture". This architecture means that beyond the existence of a unique central/national Rent@School instance, multiple Rent@School instances can be installed at local/regional scale, in a way that autonomy, performance and flexibility of all the system can be improved. This issue is introduced and discussed in this paper from two complementary perspectives: from the organizational and management

information systems perspective; and from the integration and large-scale interoperability.

UNDERSTANDING FOR ENHANCING CMOS MONOLITHIC IMAGE REJECTION MIXERS

Fernando Azevedo^{a,b}; M. João Rosário^{b,c}; J. Costa Freire^{b,c}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstituto de Telecomunicações; ^cInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *Asia-Pacific Microwave Conference-APMC, vol. 2, pp. 675-678, Kyoto, Japan, November, 2002.*

The growing needs for low power and low cost wireless mobile transceivers, have motivated researchers to study and present new monolithic solutions implemented in standard CMOS technology. Image rejection ratio in double balanced mixers is strongly dependent on the balance between its branches. The influence of the mismatches is analyzed theoretically at the system and circuit level. Guidelines to obtain a given image rejection ratio based on a deep calculation of the related maximum acceptable mismatch are presented, allowing to meet a given IRR specification. A practical circuit implementation is described: a 1.9 GHz downconversion image rejection mixer is fabricated in 0.6 μm CMOS standard technology. Measurements on this prototype showed a 34 dB image rejection and an overall conversion gain of 16 dB. Finally, experimental results are presented.

ANALOG READOUT IMAGE SENSOR BASED ON p-i-n HYDROGENATED AMORPHOUS SILICON

M. Vieira^a; M. Fernandes^a; P. Louro^a; J. Martins^a; A. Maçarico^a; R. Schwarz^a; M. Schubert^b

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInstitut für Physikalische Elektronik, Universität Stuttgart, Germany.

Publicado em: *Vacuum, vol. 64, pp. 249-254, IDS Number: 510HH, ISSN: 0042-207X, Elsevier Science LTD, Oxford, 2002.*

Amorphous 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 image is projected onto the active surface of the sensor and defines itself 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 analogue 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 analysed for different material composition ($0.5 < x < 1$). The results show that the responsivity and the spatial resolution are limited by the conductivity of the doped layers. An enhancement of 75 % in the image resolution is achieved with responsivity of 0.2 mW/cm^2 decreasing the n-layer conductivity by one order of magnitude. An analysis of the image acquisition and representation is performed. A physical model supported by an electrical simulation gave insight into the methodology used for image representation.

c-Si/a-Si:H HETEROJUNCTION WITH INTRINSIC THIN LAYER SOLAR CELLS: A SIMULATION ANALYSIS ABOUT THE J-V CHARACTERISTIC DEPENDENCE ON THE INTERFACE BAND OFFSETS

A. Fantoni^{a,b}; Y. Vygranenko^a; M. Fernandes^a; R. Schwarz^a; M. Vieira^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bFCT-UNL, Portugal.

Publicado em: *Vacuum*, vol. 65, Elsevier Science LTD, Oxford, 2002.

Recent studies on amorphous-crystalline silicon p-i-n heterojunctions (HIT, Heterojunction with Intrinsic Thin layer) have indicated the potential for these materials to be used as low cost, high efficiency solar cells. Moreover the HIT structure is also expected to be suitably applied to various semiconductor junctions for micro and optoelectronic devices. Despite this potential, the exact operation of these cells is not yet fully understood and a S-shaped J-V characteristic curve is observed under certain conditions, leading to a poor collection efficiency. We present in this paper some results, obtained using the computer simulator ASCA, about the internal electric configuration of a p a-Si:H / a-Si:H / n c-Si heterostructure under different illumination conditions. The obtained

results are related to the corresponding simulated J-V characteristic curve and compared with our experimental results, in order to explain the S-shaped J-V curve featured by these devices. The band discontinuities at the amorphous-crystalline interface are shown to be responsible for such a behavior. We find that the conduction band offset is the most limiting parameter for the optimal collection of photogenerated carriers.

ENERGY RELAXATION DURING INELASTIC ELECTRON SCATTERING ON LOCALIZED STATES

V. K. Dugaev^{a,b}; V. L. Volkov^b; M. Oszwaldowski^c; M. Vieira^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bChernovtsy Branch, Institute for Problems in Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine; ^cTechnical University, Poznan, Poland.

Publicado em: *Technical Physics Letters*, vol. 28(11), pp. 904-906, American Institute of Physics, Melville, IDS Number: 617LC, ISSN: 1063-7850, 2002.

A mechanism which can be responsible for the phase relaxation in polycrystalline semiconductors and metals is proposed. This mechanism is related to the inelastic scattering of electrons on localized states with energies near the Fermi level.

BIAS CONTROLLED SPECTRAL SENSITIVITY IN a-SiC:H p-i-n DEVICES

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Physics E*, in press.

Large area p-i-n a-SiC:H heterojunctions with low conductivity and wide band gap doped layers were produced by PE-CVD at low temperature (100 °C). Carrier transport and collection efficiency are investigated from dark and illuminated current-voltage dependence and spectral response measurements under different optical bias conditions (430 nm, 530 nm and 650 nm, $0 < \Phi_L < 1015$ ph/s). Results show that is possible to control the absorption at a given wavelength and so to tune the spectral

sensitivity by changing the electrical bias (± 0.3 V) around the open circuit voltage. The spectral response at different voltages with and without optical bias and the photocurrent-voltage dependence has been simulated and compared to experimentally obtained values. Results show that for each wavelength a specific electrical bias creates a space charge at the main absorption region causing a reversal of the electric field that hinders carrier collection at this wavelength. The field reversal leads to the collapse of the diode regime (primary photocurrent), launches surface recombination at the interfaces, which leads to a double-injection regime (secondary photocurrent). The interchange between primary and secondary photocurrent is explained by the interaction of drift and diffusion components within the photocurrent. Considerations about conduction and valence band offsets, electrical field profiles and inversion layers will be taken into account to explain the bias control of the spectral response.

NON-PIXELED AMORPHOUS SILICON BASED IMAGE SENSORS

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Physics E, in press.*

Large area hydrogenated amorphous silicon p-i-n structures with low conductivity doped layers were proposed as single element monochrome image sensors. The investigation of the sensor output under different scanner wavelengths and varying electrical bias reveals that the response can be tuned to a certain wavelength, thus enabling color separation. The measurement technique is described in detail and two methods for color separation are proposed. The sensor output characteristics are evaluated under different bias voltages and wavelengths. The color separation mechanism can be explained by the variation of the band bending with light wavelength. The operation of the sensor is exemplified under illumination with a polychromatic image and using one of the proposed detection methods.

OPTICAL PROPERTIES AND TRANSPORT IN PLD-GaN

M. Niehus^a; P. Sanguino^a; T. Monteiro^b; MJ Soares^b; E. Pereira^b; M. Vieira^c; S. Koynov^c; R. Schwarz^c

^aIST, Dept Phys, Lisboa, Portugal; ^bUniversidade de Aveiro, Dept Phys, P-3810193 Aveiro, Portugal; ^cInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^dBulgarian Acad Sci, CL SENES, Sofia 1784, Bulgária.

Publicado em: *Solid-State Electronics*, vol. 47(3), pp. 569-573, Elsevier Science LTD, Oxford, IDS Number: 641RG, ISSN: 0038-1101, March, 2003.

We present structural, optical and transport data on GaN samples grown by hybrid, two-step low temperature pulsed laser deposition. The band gap of samples with good crystallinity has been deduced from optical spectra. Large below gap band tails were observed. In samples with the lowest crystalline quality the PL spectra are quite dependent on spot laser incidence. The most intense PL lines can be attributed to excitons bounded to stacking faults. When the crystalline quality of the samples is increased the ubiquitous yellow emission band can be detected following a quenching process described by a similar activation energy to that one found in MOCVD grown samples. The samples with the highest quality present, besides the yellow band, show a large near band edge emission which peaked at 3.47 eV and could be observed up to room temperature. The large width of the NBE is attributed to effect of a wide distribution of band tail states on the excitons. Photoconductivity data supports this interpretation.

A NEW MECHANISM OF EXCHANGE INTERACTION IN FERROMAGNETIC SEMICONDUCTORS

V. K. Dugaev^{a,b}; V. I. Litvinov^c; J. Barnás^d; M. Vieira^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInst. For Problems of Materials Science, Nat. Acad. Sci. of Ukraine, Ukraine; ^cWaveBand Corporation, Torrance, USA; ^dDept. of Physics, Adam Mickiewicz University, Poland and Inst. of Molecular Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland.

Publicado em: *Physical Review Letters*, in press.

We propose a new mechanism of indirect exchange interaction, which can be responsible for the ferromagnetic ordering in Mn-doped semiconductors (like GaMnAs) at low carrier concentration. The mechanism is based on the interplay of the hybridization of band states with localized impurity states and the direct exchange interaction

between localised spins and band states. The indirect exchange coupling between two impurities occurs when the wave functions of the corresponding localized donor (acceptor) states overlap. This coupling is independent of the free carrier concentration and therefore may be responsible for ferromagnetic transition at low or vanishing carrier concentrations.

FERROMAGNETIC ORDERING IN DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS

A. H. Slobodosky^{a,b,c}; V. K. Dugaev^{a,d}; M. Vieira^d

^aInst. For Problems of Materials Science, Nat. Acad. Sci. of Ukraine, Ukraine; ^bInst. Of Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland; ^cPhysikalisches Institut, Wurzburg, Germany; ^dInstituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Condensed Matter Physics*, vol. 5, n.º 3(31), pp. 531-540, 2002.

We present a general approach to the problem of a ferromagnetic phase transition in diluted magnetic semiconductors. The Curie temperature of ferromagnetic transition is calculated in the mean field approximation. It is shown that the Curie temperature is determined by an integrated coupling between magnetic impurities.

FERROMAGNETIC ORDERING IN DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS

V. K. Dugaev^{a,b}; Y. Vygranenko^c; M. Vieira^a; V. I. Litvinov^d; J. Barnás^e

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bInst. For Problems of Materials Science, Nat. Acad. Sci. of Ukraine, Ukraine; ^cDept. of Electrical and Computer Engineering, University, Waterloo, Canada; ^dWaveBand Corporation, Torrance, USA; ^eDept. of Physics, Adam Mickiewicz University, Poland and Inst. Of Molecular Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland.

Publicado em: *Physica E*, in press.

We present a theoretical analysis and results of modelling of a new integrated device for spintronics applications, which is based on a hybrid metal-semiconductor structure. The proposed device consists of a Si-based p-i-n photodetector sandwiched between two layers of a

ferromagnetic metal. Electron-hole pairs are created in the semiconductor part of the structure by light illumination. The photocurrent flowing in such a system is shown to depend on its magnetic configuration. This is due to a difference in the specular reflection of spin-up and spin-down electrons and holes from magnetically polarized layers. This, in turn, allows controlling the device performance by an externally applied magnetic field. We have estimated magnitude of the effect and also determined the role of relevant material parameters.

FERROMAGNETISM IN DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS AT LOW CARRIER DENSITY

V. K. Dugaev^{a,b}; V. I. Litvinov^b; J. Barnás^c; A. H. Slobodskyy^d; W. Dobrowolski^e; M. Vieira^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bWaveBand Corporation, Torrance, USA; ^cDept. of Physics, Adam Mickiewicz University, Poland and Inst. of Molecular Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland; ^dPhysikalisches Institut, Würzburg, Germany; ^eInst. Of Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland.

Publicado em: *Phys. Stat. Sol., in press.*

We present a general approach to the problem of a ferromagnetic phase transition in diluted magnetic semiconductors with free carriers. The Curie temperature of ferromagnetic transition is calculated in the mean field approximation. The approach allows to analyze the effects of magnetic fluctuations and disorder on the Curie temperature. We also propose a new mechanism of exchange interaction between magnetic impurities at vanishing concentration of free carriers.

FERROMAGNETISM IN DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS AT LOW CARRIER DENSITY

V. K. Dugaev^{a,b}; V. I. Litvinov^b; J. Barnás^c; A. H. Slobodskyy^d; W. Dobrowolski^e; M. Vieira^a

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bWaveBand Corporation, Torrance, USA; ^cDept. of Physics, Adam Mickiewicz University, Poland and Inst. Of Molecular Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland; ^dPhysikalisches Institut, Würzburg, Germany; ^eInst. Of Physics, Polish Acad. of Sciences, Poland.

Publicado em: *Journal of Superconductivity, in press.*

We analyse critical temperature of ferromagnetic ordering in diluted magnetic semiconductors in the mean field approximation. Using a general field-theoretical approach we formulate a description of magnetic phase transition, which takes into account the interaction of magnetic fluctuations. We also propose a mechanism of exchange interaction between Mn impurity moments in GaMn As alloys via the Mn-induced acceptor levels. This mechanism may lead to low temperature ferromagnetism at vanishing concentration of free carriers.

a-Si:H THIN FILM TANDEM SOLAR CELL PHYSICS EXPLAINED BY MEANS OF NUMERICAL SIMULATION

Alessandro Fantoni^{a,b}; Manuela Vieira^a; Reinhard Schwarz^{a,c}

^aInstituto Superior de Engenharia de Lisboa; ^bCEMOP-UNINOVA, ^cInstituto Superior Técnico.

Publicado em: *Proceedings of the 17th World Photovoltaic Energy Conference and Exhibition, 2002, in press.*

Stacked a-Si:H pin/pin diodes are known to be more stable with respect to the light induced degradation than the conventional single junction pin structure. This can be ascribed to a better internal electric field distribution leading to an improved drift transport mechanism within the intrinsic layers. However the device performance can be limited by the reverted field associated with the internal n-p interface region (recombination junction). Such a different built-in field configuration leads to a device functioning fundamentally different from the standard p-i-n device, which can be well described through a detailed analysis of the internal electrical configuration of the device. Without questioning the consideration that the multi-junction structure needs component cells of high efficiency and that high quality layers of both intrinsic and doped materials are necessary, we understand that optimised device design also can be used successfully to improve cell performance. Bandgap profiling, as well the introduction of buffer layers between the doped and intrinsic layers, can improve the built-in field within the cell, aiding carrier transport. We have studied, as an application of the numerical simulator ASCA, the internal electrical configuration of the pin/pin structure (homo and hetero-junctions) under illumination (monochromatic and AM1.5 spectrum) and under forward applied bias. Aiming to produce a good understanding of the device physics and a general orientation for device

engineering, this paper discusses the influence of material properties (optical gap extension, conductivity, defect density, doping concentration) and of device geometry (layer thickness, recombination junction area) on the final device performance, by relating the internal distribution of charged carriers, recombination rate and potential profile to the J-V characteristic.

A NEW LSP SENSOR FOR IMAGE RECOGNITION AND COLOUR SEPARATION

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

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa.

Publicado em: *Proceedings of E-MRS 2002, European Material Research Society, in press.*

Studies on the use SiC:H p-i-n devices as Laser Scanned Photodiode (LSP) monochrome image sensors have shown its potential capability. In this work, the fact that the variation of the photocurrent with the voltage strongly depends upon the wavelength provides the LSP with its intrinsic wavelength filtering properties allowing color separation. Large area sensing elements are produced by PE-CVD at low temperature (100 °C). The i-layer is thick enough (>500 nm) to absorb all the light incoming from the image. For reading out the color signals (red, green and blue), three forward appropriated voltages around the open circuit conditions (± 0.3 V) have to be successively applied in order to combine information to yield a color image. The high resistive and wide band gap doped layers confine the photogenerated carriers at the illuminated regions and driven by the scanner extract information on the image range and intensity. The forward bias controls the absorption and the electric field across the main generation region. As the applied bias increases the reversed electrical field in the bulk shifts and successively suppress the ac component of the photocurrent at each primary color allowing color extraction. The device performance is analyzed and the scanning technique for color separation improved. The effects of the bias on image contrast; resolution and color separation are discussed. A physical model for image and color recognition is presented and supported by a two dimensional simulation.

ARGON TEMPERATURE AND DENSITY VERSUS THE INPUT POWER IN A HIGH PRESSURE PLANAR MAGNETRON DISCHARGE

M. L. Escrivão^a; P. J. S. Pereira^b; J. L. Ferreira^a; M. R. Teixeira^a; M. J. P. Maneira^a

^aCEFITEC, Departamento de Física, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, Quinta da Torre, 2825-114 Monte de Caparica, Portugal; ^bÁrea Científica de Matemática, Instituto Superior de Engenharia, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal.

Publicado em: *Vacuum 64 (2002) 367-371*

Experimental and theoretical studies of sputtered atoms transport, between target and substrate, give some understanding about the behaviour of the deposition rate in magnetron cathode glow discharges. The present work refers to an experimental study about the dependence of deposition rate, R , on pressure, in an Ar magnetron discharge on a Cu target, at a pressure range extending from 10 to 67 Pa. The experimental results show that R is inversely proportional to pressure, supporting the predictions of a diffusive model for the transport of the sputtered atoms, from the cathode to the substrate, proposed by Helmer and Wickersham. From the results and extending that model, the argon temperature and density, as well as the mean free path of target atoms in the region between cathode and substrate, have been obtained as a function of discharge power. © 2002 Elsevier Science Ltd. All rights reserved.

CARACTERÍSTICAS CORRENTE-PRESSÃO EM DESCARGA MAGNETRÃO PLANAR (ARGON-COBRE).

M. L. Escrivão^a; P. J. S. Pereira^b; M. H. Cabral^a; M. R. Teixeira^a; M. J. P. Maneira^a

^aCEFITEC, Departamento de Física, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, Quinta da Torre, 2825-114 Monte de Caparica, Portugal; ^bÁrea Científica de Matemática, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal.

Palestra em: *Workshop 2002-CeFITec. FCT/UNL, Monte da Caparica, Janeiro de 2002.*

A presente comunicação versa a apresentação das curvas experimentais que traduzem a característica corrente-tensão-pressão numa descarga magnetrão planar em argon sobre cobre e dos estudos matemáticos que permitiram derivar uma solução analítica simples da função integral que exprime o parâmetro K do modelo teórico de Maniv *et al.* [1] para a

característica J-V (densidade de corrente-tensão), usado na interpretação dos resultados experimentais obtidos.

[1] S. Maniv, W. D. Westwood and P. J. Scanlon, *J. Appl. Phys.* 53, 856 (1982).

INFLUENCE OF THE INTRINSIC LAYER CHARACTERISTICS ON A-SI:H P-I-N SOLAR CELL PERFORMANCE ANALYSED BY MEANS OF A COMPUTER SIMULATION

Alessandro Fantoni^{a,b}; Manuela Vieira^a; Rodrigo Martins^b

^aSEL, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1900 Lisboa, Portugal; ^b FCT-UNL, Quinta da Torre, 2825 Monte de Caparica, Portugal.

Publicado em: *Solar Energy Materials and Solar Cells, Elsevier, C 73 (2): 151-162 (2002)*

In this paper a set of one-dimensional simulations of a-Si:H p-i-n junctions under different illumination conditions and with different intrinsic layer are presented. The simulation program ASCA permits the analysis of the internal electrical behaviour of the cell allowing a comparison among the different internal configurations determined by a change in the input set. Results about the internal electric configuration will be presented and discussed outlining their influence on the current tension characteristic curve. Considerations about the drift-diffusion and the generation-recombination balance distributions, outlined by the simulation, can be used to explain the correlation between the basic device output, the i-layer characteristics (thickness and DOS), the incident radiation intensity and photon energy.

PRODUCTS OF MATRICES WITH PRESCRIBED SPECTRA AND RANKS

Susana Furtado^a; Laura Iglésias^b; Fernando C. Silva^c

^aFaculdade de Economia, Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200 Porto, Portugal, email: sbf@fep.up.pt; ^bInstituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: laura@hermite.cii.fc.ul.pt; ^cDepartamento de Matemática, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1749-016 Lisboa, Portugal, email: fcsilva@fc.ul.pt

This research was done within the activities of the Centro de Estruturas Lineares e Combinatórias and was partially supported by Fundação para a Ciência e Tecnologia and Programa Ciência, Tecnologia e Inovação do Quadro Comunitário de Apoio

Publicado em: *Linear Algebra and its Applications, Vol. 340 (1-3) (2002) pp. 137-147*

This paper studies the possibility of writing a given square matrix as the product of two matrices with prescribed spectra and ranks. It extends some previously known results.

ALGORITMO ALCUM - ALGORITMO CONSTRUTIVO COM UNIDADES DE MEMÓRIA.

Gonçalo Xufre Silva

Centro de Matemática - Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N° 1, 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: goncalo@dem.isel.ipl.pt;

Palestra em: *10º Congresso da Associação Portuguesa de Investigação Operacional, 25 e 26 de Março de 2002, Universidade do Minho, Guimarães.*

Treinar redes neuronais recorrentes, quando em presença de problemas variantes no tempo, é uma tarefa que se sabe ser bastante difícil. Este artigo discute métodos para resolver parcialmente este problema. Primeiro, é feita uma breve discussão sobre a origem da dificuldade em treinar redes neuronais recorrentes, relacionando-a com as características da função de custo e o valor das suas derivadas quando em presença de longas dependências temporais. É, depois, mostrado que o uso de passos adaptativos e controlo do erro é particularmente útil para lidar com este tipo de funções de custo. É realizado um estudo sobre uma nova variante das unidades com memória de curta duração longa (MCDL). É demonstrado que o uso de uma versão simplificada destas unidades, numa arquitetura construtiva, é igualmente útil, para aumentar a eficiência do treino das redes neuronais recorrentes.

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

Vieira M^a; Fernandes M^a; Louro P^a; Vygranenko Y^a; Fantoni A^a; Schwarz R^a; Schubert M^b

^aISEL, Elect & Commun Dept, P-1949014 Lisbon, Portugal; ^bUniv Stuttgart, Inst Phys Elekt, D-70569

Stuttgart, Germany

Publicado em: *Journal of non-Crystalline Solids*, 299: 1245-1249 Part B Apr 1 (2002)

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 pm. An increased light-to-dark sensitivity, a flux range of two orders of magnitude and a responsivity lower than $6.5 \mu\text{W cm}^{-2}$ were obtained under slightly reverse voltage. (C) 2002 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

PHOTOCARRIER RESPONSE TIME SCANNER

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

^aISEL, Dept Elect & Commun, P-1940014 Lisbon, Portugal; ^bIST, Dept Phys, P-1049001 Lisbon, Portugal

Publicado em: *Journal of non-Crystalline Solids*, 299: 1261-1266 Part B Apr 1 (2002)

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 cm^2 detector. © 2002 Published by Elsevier Science B.V.

CONFIGURAÇÃO ELÉCTRICA INTERNA DE CÉLULAS SOLARES DE SILÍCIO AMORFO DE TIPO P-I-N: A IMPORTÂNCIA DA CAMADA INTRÍNSECA ESTUDADA ATRAVÉS DE UMA SIMULAÇÃO NUMÉRICA.

Alessandro Fantoni

ISEL-DEETC, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1900 Lisbon, Portugal

Palestra em: *Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia- (ISEL, Lisboa, Maio 2002)*

Este trabalho propõe-se estudar o comportamento eléctrico interno de células solares de silício amorfo de tipo p-i-n.

A importância da camada intrínseca será estudada através do programa de simulação numérica ASCA; parâmetros como a sua espessura e a densidade de defeitos são postos em relação com a distribuição interna do potencial, do campo eléctrico, de portadores de carga eléctrica e da taxa de recombinação em condições de diferente iluminação (luz monocromática, branca, e de diferente intensidade) e de tensão aplicada.

ITERATED MAPS WITH HOLES AND HAUSDORFF DIMENSION

J. Leonel Rocha^a; J. Sousa Ramos^b

^aÁrea Científica de Matemática, Instituto Superior de Engenharia, R. Conselheiro Emídio Navarro 1, 1949-014 Lisboa, Portugal; ^bDepartamento de Matemática, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal.

Palestra em: *14th European Conference on Iteration Theory, ECIT 2002, Évora, Portugal, 1 a 7 de Setembro de 2002.*

We study maps of the interval with several discontinuity points and holes. Using a fractal stochastic matrix we show the relation between Hausdorff dimension, fractal metric entropy and fractal Lyapunov exponent.

DESCARGA MAGNETRÃO PLANAR. COMPORTAMENTO BIMODAL EM CARACTERÍSTICAS CORRENTE-PRESSÃO.

M. L. Escrivão^a; P. J. S. Pereira^b; M. H. Cabral^a; M. R. Teixeira^a; M. J. P. Maneira^a

^aCEFITEC, Departamento de Física, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, Quinta da Torre, 2825-114 Monte de Caparica, Portugal; ^bÁrea Científica de Matemática, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, R. Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal.

Publicado em: *Livro de Resumos da 13^a Conferência de Física, Évora, Setembro de 2002*

A presente comunicação refere-se a um estudo experimental efectuado sobre a variação da intensidade da corrente, I , com a pressão, p , a tensão catódica constante, V , no domínio de pressões $3.3 \text{ Pa} \leq p \leq 66.7 \text{ Pa}$, no caso de uma descarga magnetrão planar em argon sobre cobre.

Da análise dos resultados concluiu-se que a característica corrente-tensão-pressão é bem traduzida pela seguinte relação:

$$I = a (p-p_0)^2 \exp(-bp) + c (p-p_0), \quad (1)$$

em que a , b , c , são parâmetros variáveis com a tensão e p_0 é a pressão de ignição da descarga, para uma dada tensão.

Os termos da relação (1) foram interpretados de acordo com um modelo teórico da literatura que, conjuntamente com os dados experimentais, permitiu fazer uma estimativa da espessura do espaço escuro catódico.

SISTEMA DE APOIO AO ESTUDO ATRAVÉS DA INTERNET.

Gonçalo Xufre Silva

Centro de Matemática - Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro, N^o 1, 1949-014 Lisboa, Portugal, Email: goncalo@dem.isel.ipl.pt;

Palestra em: *XIII Seminário de Investigação em Educação Matemática, 30 de Setembro e 1 de Outubro de 2002, Escola Superior de Tecnologia de Viseu.*

Em Portugal, à semelhança de outros países, as instituições de Ensino Superior começam a despertar para as potencialidades da Internet no desenvolvimento de programas de ensino. No entanto, a abordagem efectuada tem sido essencialmente direccionada para o desenvolvimento técnico das aplicações (a sua capacidade de guardar e distribuir informação, a utilização de som e imagem, etc.) e não tanto para as

questões de natureza pedagógica, existindo um novo campo de investigação no domínio da tecnologia educativa.

Desenvolver programas/cursos através da Internet, com êxito, é uma tarefa difícil. Não se trata, apenas, de um problema de transposição das aulas tradicionais para um novo meio, mas de rentabilizar as possibilidades abertas pelas Tecnologias de Informação e Comunicação (TIC), de modo a conceber, implementar e avaliar o ensino e, mais importante, a aprendizagem.

Nesta comunicação iremos apresentar uma experiência piloto (efectuada na disciplina de Estatística e Probabilidades) de desenvolvimento de um sistema de apoio ao estudo através da Internet onde parece possível ultrapassar as fronteiras da educação à distância e da educação presencial. O que se pretende é tirar o máximo proveito dos dois sistemas de ensino (presencial e à distância), repensando os conceitos de ensino e aprendizagem e tirando partido das novas possibilidades abertas pelas TIC.

a-Si:H THIN FILM TANDEM SOLAR CELL PHYSICS EXPLAINED BY MEANS OF NUMERICAL SIMULATION.

Alessandro Fantoni, Manuela Vieira, Reinhard Schwarz

ISEL-DEETC, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

Palestra em: *PV in Europe Conference and Exhibition, From PV Technology to Energy Solutions- 7 - 11 October 2002, in printing*

Stacked a-Si:H pin/pin diodes are known to be more stable with respect to the light induced degradation than the conventional single junction pin structure. We have studied, as an application of the numerical simulator ASCA, the internal electrical configuration of the pin/pin structure (homo and hetero-junctions) under illumination (monochromatic and AM1.5 spectrum) and under forward applied bias. Aiming to produce a good understanding of the device physics and a general orientation for device engineering, this paper discusses the influence of material properties (optical gap extension, conductivity, defect density, doping concentration) and of device geometry (layer thickness, recombination junction area) on the final device performance, by relating the internal distribution of charged carriers, recombination rate and potential profile to the J-V characteristic.

A DISTRIBUTED WEB-BASED K-12 MANAGEMENT SYSTEM

João Ferreira^a; Alberto Silva^a; Rui Azevedo^b; Gonçalo Borrêga^c

^aISEL; ^bDEI-IST-UTL; ^cINESC-ID Lisboa (jferreira@deec.isel.ipl.pt, alberto.silva@acm.org)

Publicado em: *E-Learn 2002, ISSN 1-880094-46-0, pp. 1455-1458, Association for the advancement of Computing in education (AACE), 15-19 October 2002, Montréal, Canada.*

The project "Rent@School - Bringing the Future to the Education" is a research effort to study and prototype information system architectures to support, standardize, and facilitate the management of K12 schools at a national scale. It looks for the sharing and dissemination of relevant information among different stakeholders, based on the ASP model and also on a novel architecture, which we called "distributed and multi-instance web architecture". This architecture means that beyond the existence of a unique central/national Rent@School instance, multiple Rent@School instances can be installed at local/regional scale, in a way that autonomy, performance and flexibility of all the system can be improved.

This issue is introduced and discussed in this paper from two complementary perspectives: from the organizational and management information systems perspective; and from the integration and large-scale interoperability.

CONTROLLING THE LATERAL PHOTOEFFECT IN a-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

ISEL-DEETC, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1900 Lisbon, Portugal

Publicado em: *Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 685, A25.11 (2002)*

When an a-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.

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.

PRODUCTS OF REAL MATRICES WITH PRESCRIBED CHARACTERISTIC POLYNOMIALS

Susana Furtado^a; Laura Iglésias^b; Fernando C. Silva^c

^aFaculdade de Economia, Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200 Porto, Portugal, email: sbf@fep.up.pt; ^bInstituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: laura@hermite.cii.fc.ul.pt; ^cDepartamento de Matemática, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1749-016 Lisboa, Portugal, email: fcsilva@fc.ul.pt

Publicado em: *SIAM Journal on Matrix Analysis*, Vol. 23 (3) (2001) pp. 656-672

Let A be a matrix with entries in the field of real numbers. In this paper we give necessary and sufficient conditions for the existence of real matrices B and C , with prescribed characteristic polynomials, such that $A=BC$.

FUNDAMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA

F. Correia dos Santos

Editado por: *Edições Sílabo, Lda.; Coleção Matemática, nº 19; Lisboa, Outubro de 2002*

Este livro apresenta alguns conceitos fundamentais da Análise Numérica, numa vertente teórico-prática, em que o desenvolvimento teórico é intercalado com numerosos exemplos e exercícios resolvidos, de modo a bem consolidar a teoria apresentada. Os temas abordados são os seguintes: representação de números reais, erros, sistemas de equações lineares, equações e sistemas não lineares, aproximação de funções, interpolação, derivação numérica, integração numérica e equações diferenciais.

Pretende-se que o aluno estude Análise Numérica de uma forma fortemente apoiada na Análise Matemática e Álgebra Linear, pelo que se englobam alguns Anexos referentes a conhecimentos considerados indispensáveis, bem como uma bibliografia seleccionada nestas áreas.

Os exercícios propostos, com soluções, intercalados no texto e finais, constituem um modo do leitor ir avaliando o seu processo de aprendizagem.

PROTECÇÃO CATÓDICA: UMA APLICAÇÃO NO GASODUTO TRANSGÁS

J.A. Rocha A. Soares

Departamento de Engenharia Mecânica, Instituto Superior Engenharia de Lisboa

Publicado em: *Livro das Comunicações das 3^{as} jornadas do grupo de Revestimentos Funcionais, CRF 2002.*

Foram descritos os processos de corrosão que afectam os Gasodutos que compõem a Rede de Transporte Nacional de Gás Natural em alta pressão e os métodos que minimizam os aspectos negativos que afectam a integridade estrutural dos tubos de aço que os compõem.

Foi apresentado o Método de Cálculo de Resistividade dos solos. A implementação de ânodos de sacrifício no terreno.

O princípio da Protecção Catódica. A constituição do sistema da Protecção Catódica por “corrente impressa”.

A conformidade da implementação do sistema de acordo com normas e códigos internacionais aplicáveis, ANSI/ASME B 31.8, NACE MR-01-75, NAPCA 1-65.83, DIN 30675.

OPTIMIZAÇÃO DE UMA CALDEIRA VERTICAL RECUPERADORA DE CALOR E DE CIRCULAÇÃO NATURAL

Luis Grácio^a ; Isabel S. Carvalho^b ; Paulo Félix^c

^a ALSTOM Power Portugal, Boilers S.A., Setúbal

^b Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1950 – 062 Lisboa, Portugal, e-mail: icarvalho@dem.isel.ipl.pt

^c EDP Produção EM, Grupo EDP

Publicado em: *2.^{as} Jornadas Politécnicas de Engenharia Mecânica, Automóvel, Gestão Industria, Energia e Ambiente, Setúbal, Portugal, Novembro 2002.*

Este trabalho dedica-se ao estudo de uma caldeira vertical recuperadora de calor com três níveis de pressão, circulação natural e sistema de reaquecimento (HRSG – Heat Recovery Steam Generator) em regime estacionário, sendo parte integrante de uma central termoelectrica a ciclo combinado. De acordo com as leis fundamentais da termodinâmica, foi elaborado um modelo analítico em MsExcel que simula o efeito dos mecanismos de permuta de calor, visando a optimização quantitativa da caldeira. É analisada a distribuição dos caudais de água/vapor em função de parâmetros de controlo, como o “Approach Point”, o “Pinch Point”, a temperatura dos gases quentes à saída da chaminé e a temperatura do vapor sobreaquecido à saída dos três níveis de pressão da caldeira. O modelo desenvolvido é aplicável a qualquer tipo de caldeira, permitindo controlar e monitorizar detalhadamente todos os parâmetros de operação e de segurança, prevendo situações de funcionamento e análise de soluções, sem comprometer o rendimento e a potência térmica da

caldeira. O estudo e visualização numérica do escoamento gasoso, simulado para as mesmas condições fronteira usadas no modelo em MsExcel, visa a validação e a optimização do modelo analítico, através da comparação e transferência directa dos resultados numéricos para o sistema analítico.

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

Michal Bartys^a; João Calado^b; Ron Patton^c; Joseba Quevedo^d

^a Warsaw University of Technology, e-mail: bartys@mchtr.pw.edu.pl

^b Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, e-mail: jcalado@dem.isel.ipl.pt

^c University of Hull, e-mail: r.j.patton@hull.ac.uk

^d Universitat Politècnica de Catalunya, e-mail: joseba@esaii.upc.es

Publicado em: *Computing & Control Engineering Journal, Outubro 2002, pp. 247-253.*

The likelihood that actuator systems (e.g. control valves, servo motors, positioners) will malfunction is significant when these components are installed in harsh environments (e.g. with high temperature, humidity, pollution, chemical solvents, aggressive media, etc.). Determination of small (incipient, hard to detect) faults before they become serious clearly has an important influence on the actuator's predicted lifetime. Thus, this paper describes an engineering research study into the technology requirements and methods that can be used to detect and uniquely isolate some various faults in an electro-pneumatic valve actuator. The research focuses on the development and integration of model-based, statistical and soft computing methods, using different levels of benchmark study and comparison. The research is being conducted within the framework of real application to a series of electro-pneumatic valve actuators in the Cukrownia Lublin SA sugar factory in Poland. The longer term research aim is to provide further technology transfer into the development of intelligent actuation systems (e.g. "smart positioners").

HIDRODECAPAGEM UMA ALTERNATIVA ECOLÓGICA

Samuel Farraia^a; José Braga^a; Carlos da Maia^a; Carmen Brites^b; Teresa Santos^b; Dulcinea Santos^b

^a TECOR – Tecnologia Anticorrosão, S.A.

^b INETI

Publicado em: *3^{as} Jornadas da Revista de Corrosão e Protecção de Materiais – INETI, Outubro 2002.*

A preparação de superfícies desempenha um papel preponderante na luta contra a corrosão, permitindo a obtenção de condições uniformes adequadas à compatibilidade físico-química entre estas e os revestimentos a aplicar posteriormente. Estima-se entretanto que a causa

de cerca de 80% das falhas prematuras dos revestimentos, seja a incorrecta ou inadequada preparação das superfícies sobre as quais aqueles são aplicados. Apesar de estarem disponíveis variadas tecnologias de preparação de superfícies, a mais utilizada é a preparação mecânica normalmente designada por decapagem mecânica que pode ser realizada manualmente, com ferramentas electromecânicas ou por projecção a jacto abrasivo.

Induzida por motivos ambientais, tem cada vez maior aplicação a tecnologia de hidrodapagem a muito alta pressão, com vantagens significativas sob diversos pontos de vista, nomeadamente:

- O reduzido teor de sais residente após tratamento (aprox. 5 x menor que o abrasivo seco).
- Não contaminação do ar e dos espaços adjacentes;
- Menores custos no tratamento dos resíduos dada a possibilidade de filtragem e recirculação da água utilizada;
- Permitindo a pintura imediata;
- Evitando o encruamento do material (deformação a frio).

RECOVERING THE FORCE/POSITION CONTROL PERFORMANCE UNDER UNCERTAINTIES USING A FUZZY INTEGRATED APPROACH

Silvério J. C. Marques^a; José M. G. Sá da Costa^b

^a Polytechnic Institute of Lisbon, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Department of Mechanical Engineering, Avenida Conselheiro Emídio Navarro, 1900 Lisboa, Portugal, Phone: +351-218317136, Fax: 351-218317213, E-mail: smarques@dem.isel.ipl.pt

^b Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico Department of Mechanical Engineering, GCAR/IDMEC Avenida Rovisco Pais, 1096 Lisboa Codex, Portugal Phone: +351-218417921, Fax: 351-218498097 E-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Proceedings of the 5th Portuguese Conference on Automatic Control*, pp. 329-334, Aveiro - Portugal, September 5-7, 2002.

In this paper is proposed a control structure integrating fuzzy adaptive and fuzzy robust position and force control, in an explicit position based force control strategy, to compensate for modeling uncertainties of the manipulator and environment. The fuzzy robust controller is a position controller in the inner control loop, to compensate for uncertainties in the robot manipulator model. The control surfaces in the boundary layers are designed, so that the region near the origin of the state space can be reached faster. The fuzzy adaptive controller in the outer loop adjusts the manipulator tip position to compensate for uncertainties in the environment (stiffness and geometric location) with the purpose of reducing the error force. It uses a fuzzy inverse model and a learning mechanism to adapt the membership functions of the fuzzy logic controller. To show the performance on tracking force/position trajectories and to validate the proposed control structure scheme, simulations results are presented with a three degree of freedom manipulator.

NUMERICAL SIMULATION AND DESIGN OF COMPLEX COMPOSITE STRUCTURES

A. M. C. S. Leite^a; Z. Dimitrovová^b, J. M. C. Travassos^a

^a Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Projecto Mecânico, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 013, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: leite@dem.isel.ipl.pt, e-mail: joaot@dem.isel.ipl.pt.

^b IDMEC, Instituto de Engenharia Mecânica, Tel.: + 351 218 419 462, Fax: + 351 218 417 915, e-mail: zdimitro@dem.ist.utl.pt /Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, e-mail: zuzana@dem.isel.ipl.pt,

Publicado em: *CD-ROM de resumos (sessão 8-B) da UMTIK 2002 – 10th International Conference on Machine Design and Production, Cappadocia, Turquia, Setembro 2002.*

The aim of this paper is to present a detailed parametric study of complex fiber reinforced composite – metallic structure static behavior. Advantages versus disadvantages of two different finite element (FE) models used in numerical simulation performed by general purpose FE software ANSYS are discussed in detail. Numerical results are verified by experimental measurements using HBM/Spider, 8-600Hz. Detailed parametric study exploits APDL - ANSYS Parametric Design Language. Obtained results allow making important conclusions about optimization of the present composite-metallic structure with the aim to reduce the manufacturing cost and weight while keeping the required structural resistance.

A STUDY ON IMPEDANCE SELECTION FOR ROBOT FORCE CONTROL

F. M. Campos^a; L. F. Baptista^b; J. M. F. Calado^a; 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: fcampos@dem.isel.ipl.pt, Tel.: +351 218 317 083, Fax: + 351 218 317 057, e-mail: jcalado@dem.isel.ipl.pt

^b Departamento de Engenharia Marítima, Av. Eng. Bonneville Franco, 2780-572 Paço de Arcos, Portugal, Telef.: +351 214 46 00 16, e-mail: luisbaptista@enautica.pt

^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 Controlo 2002 – 5th Portuguese Conference on Automatic Control, pp. 483-484, Aveiro, Portugal, Setembro 2002.*

This paper documents the application of impedance force control on a Puma 560 robot, focusing on the impedance parameters selection. The philosophy of this strategy is defined, and its limitations and stability are discussed. The parameters selection is strongly affected by the specifics of the application such as the environment properties, the accuracy of these values and the magnitude of the forces allowed. The purpose of this paper is to provide some knowledge about the influence of each parameter, and some guidelines on how to select them in order to guarantee stability and achieve good force tracking performance.

PRUNING ALGORITHM APPLIED TO A HIERARCHICAL STRUCTURE OF FUZZY NEURAL NETWORKS: CASE STUDY

M. J. G. C. Mendes^a, J. M. F. Calado^a, 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, 1950-062 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.: + 351 218 417 187, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Actas da MMAR'2002 – 8th IEEE International Conference on Methods and Models in Automation and Robotics, Vol. 1, pp. 207-212, Szczecin, Polónia, Setembro 2002.*

This research paper is concerned with the fault detection and isolation (FDI) problem, or more exactly, with a hierarchical structure of fuzzy neural networks (HFNN) used for fault isolation purposes in industrial processes. The main aim of this research work is to optimise the number of neurons in the hidden layer of all fuzzy neural networks (FNNs) used in the HFNN. Thus, the optimal brain surgeon (OBS) pruning algorithm has been used to prune all FNNs. After the OBS optimisation, the HFNN structure continues to be able to isolate correctly, abrupt and incipient, single and multiple faults. At the same time, the structure became simpler and better generalisation capabilities have been observed. A continuous binary distillation column having several actuated valves with PID control loops has been used as test bed of the proposed approach.

FAULT ISOLATION APPROACH USING A PROFIBUS NETWORK: A CASE STUDY

M. J. G. C. Mendes^a, M. Kowal^b, J. M. F. Calado^a, 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, 1950-062 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 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: 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 CONTROLO'2002 – 5th Portuguese Conference on Automatic Control, pp. 525-530, Aveiro, Portugal, Setembro 2002.*

This paper presents the second stage, of a two-stage neuro-fuzzy system, used for fault isolation (FI) in dynamic processes and it's built using a hierarchical structure of fuzzy neural networks. The current approach is tested under a hardware bench constructed with components commonly used in the industry and consists on a pilot plant under supervision, a supervision unit, fault detection and isolation unit and a fault simulation

unit. All the elements are connected to a PROFIBUS network, which acts as the communication system for exchanging information between the automation system and the distributed field devices.

FUZZY COMPENSATING FOR UNCERTAINTIES ON FORCE CONTROL: AN INTEGRATED APPROACH

Silvério J. C. Marques^a; José M. G. Sá da Costa^b

^a Polytechnic Institute of Lisbon, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Department of Mechanical Engineering, Avenida Conselheiro Emídio Navarro, 1900 Lisboa, Portugal, Phone: +351-218317136, Fax: 351-218317213, E-mail: smarques@dem.isel.ipl.pt

^b Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico Department of Mechanical Engineering, GCAR/IDMEC Avenida Rovisco Pais, 1096 Lisboa Codex, Portugal Phone: +351-218417921, Fax: 351-218498097 E-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Proceedings of the 10th Mediterranean Conference on Control and Automation – Instituto Superior Técnico, Lisboa-Portugal, July 9-12, 2002.*

In this paper it is proposed a control structure which integrates a fuzzy adaptive schema with a fuzzy sliding mode approach in a position based explicit force control strategy, to compensate for modelling uncertainties of the manipulator model and environment, load variation and external disturbances as well. This control structure allows for uncertainties compensation in an integrated way, in two distinct places of the control loop: at the reference trajectory and into the inner position controller. This position controller is a fuzzy sliding mode controller which warrants for robustness due to uncertainties in the manipulator model. In the outer loop a fuzzy adaptive controller adjusts the manipulator tip position at the perpendicular direction to the surface environment compensating for uncertainties in the environment, like stiffness and geometric location, with the purpose of reducing the error in force. To show the performance on executing force/position control tasks and to validate the proposed control structure, simulations results are presented considering the first three degree of freedom Puma560 manipulator.

INTEGRATING FUZZY ADAPTIVE AND FUZZY ROBUST FORCE/POSITION CONTROL OF ROBOT MANIPULATORS

Silvério J. C. Marques^a; José M. G. Sá da Costa^b

^a Polytechnic Institute of Lisbon, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Department of Mechanical Engineering, Avenida Conselheiro Emídio Navarro, 1900 Lisboa, Portugal, Phone: +351-218317136, Fax: 351-218317213, E-mail: smarques@dem.isel.ipl.pt

^b Technical University of Lisbon, Instituto Superior Técnico Department of Mechanical Engineering, GCAR/IDMEC Avenida Rovisco Pais, 1096 Lisboa Codex, Portugal Phone: +351-218417921, Fax: 351-218498097 E-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Proceedings of the 15th World Congress of IFAC-International Federation of Automatic Control, pp, Barcelona – Spain, July 20-27, 2002.*

In this paper is proposed a control structure integrating fuzzy adaptive and fuzzy robust position and force control in an explicit position based force control strategy to compensate for modeling uncertainties of the manipulator and environment. The fuzzy robust controller is a position controller in the inner control loop, to compensate for uncertainties in the robot manipulator model. The control surfaces in the boundary layer are designed, so that the region near the origin of the state space can be reached faster. The fuzzy adaptive controller in the outer loop adjusts the manipulator tip position to compensate for uncertainties in the environment (stiffness and geometric location) with the purpose of reducing the error force. It uses a fuzzy inverse model and a learning mechanism to adapt the membership functions of the fuzzy logic controller. To show the performance on tracking force/position trajectories and to validate the proposed control structure scheme, simulations results are presented with a three degree of freedom manipulator. *Copyright ©2002 IFAC.*

SYSTEM IDENTIFICATION USING DYNAMIC NEURAL NETWORKS: TRAINING AND INITIALIZATION ASPECTS

V.M. Becerra^a; J.M.F. Calado^b; P.M. Silva^b; F. Garces^a

^a The University of Reading Department of Cybernetic, Whiteknights Reading RG6 6AY, United Kingdom, e-mail: v.m.becerra@reading.ac.uk

^b 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.: +351 218 317 083, Fax: + 351 218 317 057, e-mail: jcalado@dem.isel.ipl.pt, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: psilva@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Actas do IFAC'02 – World Congress of the International Federation of Automatic Control., pp., Barcelona, Espanha, Julho 2002.*

This paper explores training and initialization aspects of dynamic neural networks when applied to the nonlinear system identification problem. A well known dynamic neural network structure contains both output states and hidden states. Output states are related to the outputs of the system represented by the network. Hidden states are particularly important in allowing dynamic neural networks to approximate complex nonlinear dynamics. An optimisation based method is proposed in this paper for properly initialising the hidden states of a dynamic neural network, so as to avoid the introduction of bias in the network parameters as a result of incorrect hidden state initialisation. Furthermore, a simple optimisation based method is proposed to initialise the hidden states once the network has been trained. The methods are illustrated with experimental data taken from a laboratory scale pressure plant.

NON-LINEAR IDENTIFICATION USING A COMBINED LINEAR AND RIDGE-WAVELET STRUCTURE

V.M. Becerra^a; R.K.H. Galvão^b; J.M.F. Calado^c; P.M. Silva^c

^a The University of Reading Department of Cybernetic, Whiteknights Reading RG6 6AY, United Kingdom, e-mail: v.m.becerra@reading.ac.uk

^b ITA Div. Eng. Electrónica São José dos Campos - SP Brazil, e-mail: kawakami@ele.ita.br

^c 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.: +351 218 317 083, Fax: + 351 218 317 057, e-mail: jcalado@dem.isel.ipl.pt, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: psilva@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Actas 10th IEEE Mediterranean Conference on Control and Automation, Lisboa, Portugal, Julho 2002.*

This paper extends a recent result concerning the orthogonality between multidimensional wavelets and linear functions to wavelets of the ridge type. Based on this orthogonality property, a network structure comprising a linear and a ridge wavelet term is proposed. The parameters of this structure, termed linear-wavelet networks, can be adjusted by back propagation of the output error, with basis on a training set of input-output data. The proposed linear-wavelet network is applied to the identification of a pressure plant from experimental data. In this case study, the introduction of wavelets does improve both the modeling and validation performances of a purely linear model.

NEURO-FUZZY FAULT DETECTION APPROACH USING A PROFIBUS NETWORK

J. M. F. Calado^a, 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, 1950-062 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 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: 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 MED'2002 – 10th IEEE Mediterranean Conference on Control and Automation, TUP 3-1 (CD-ROM), Lisboa, Portugal, Julho 2002.*

This paper presents a fault detection approach based on a hardware bench constructed with components commonly used in industry that consists on a pilot plant under supervision, a supervision unit, a fault detection unit and a fault simulation unit. All the elements are connected to a PROFIBUS network that acts as the communication system exchanging information between automation system and distributed field devices. The fault detection methodology, which is based on neuro-fuzzy models, has been developed and implemented. During the current studies actuator faults, sensor faults and leakages have been considered as incipient and abrupt faults. Several studies have also been performed under multiple simultaneous faulty scenarios.

NEURO AND NEURO-FUZZY HIERARCHICAL STRUCTURES COMPARISON IN FDI: A CASE STUDY

J. M. F. Calado^a, M. J. G. C. Mendes^a, J. M. G. Sá da Costa^b, J. Korbicz^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, 1950-062 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.: + 351 218 417 187, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

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

Publicado em: *Actas da b'02 – 15th IFAC World Congress on Automatic Control, T-We-A10 (CD-ROM), Barcelona, Espanha, Julho 2002.*

In this paper a hierarchical structure of several artificial neural networks has been developed for fault isolation purposes. Two different approaches have been considered. The hierarchical structure is the same for both approaches, but one uses multi-layer feedforward artificial neural networks and the other uses fuzzy neural networks. A result comparison between the two architectures will be presented. It is aimed to isolate multiple simultaneous abrupt and incipient faults from only single abrupt fault symptoms. A continuous binary distillation column has been used as test bed of the current approaches.

NEURO-FUZZY STRUCTURES IN FDI SYSTEMS

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, 1950-062 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: 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 b'02 – 15th IFAC World Congress on Automatic Control, T-We-A10 (CD-ROM), Barcelona, Espanha, Julho 2002.*

Fault diagnosis systems have an important role in industrial plants because the early fault detection and isolation (FDI) can minimize 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 (N-F) 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 actuators of one sugar factory.

IMPACTO BALÍSTICO EM MATERIAIS COMPÓSITOS DE MATRIZ POLIMÉRICA

Acácio D. Gonçalves^a, João M. Travassos^a

^a Departamento de Engenharia Mecânica, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, e-mail: joaot@dem.isel.ipl.pt, página web: <http://www.isel.ipl.pt>

Publicado em: *Actas do V Congresso de Métodos Numéricos en Ingeniería, e em CD-ROM, Madrid, Espanha, Junho 2002.*

O objectivo deste estudo consiste na aplicação de um modelo matemático para determinação do comportamento de placas em materiais compósitos sujeitas a impactos balísticos.

O algoritmo é descrito e usado através de uma aplicação computacional, permitindo saber se, para um determinado projectil, conhecendo-se a sua forma, massa e velocidade de impacto, penetra num determinado alvo, conhecidas também as suas propriedades mecânicas e, se penetrar, qual será a sua velocidade residual.

O algoritmo utilizado requer apenas duas velocidades de impacto com penetração (número de ensaios idênticos suficientes para valores estatísticos) em qualquer tipo de alvo em materiais compósitos de matriz polimérica. Assim, com um número mínimo de ensaios, custos e tempo, será possível prever com suficiente precisão, para diferentes distâncias, a penetração ou captura do projectil, bem como, a espessura mínima do alvo necessária para a sua captura (limite balístico) para essas distâncias. Para a realização dos ensaios foram utilizados dois tipos de materiais compósitos: placas de poliéster reforçadas com fibra de vidro e placas de carbono de matriz fenólica. Foram utilizadas para os ensaios balísticos munições de calibre 7.62 mm NATO FMJ.

Da comparação entre os resultados obtidos nos ensaios balísticos e os resultantes do modelo descrito, pode-se concluir que, são bastante satisfatórios e precisos de acordo com os modelos de 0 e 100% de compressibilidade.

LINEAR-WAVELET MODELS FOR NON-LINEAR IDENTIFICATION APPLIED TO A PRESSURE PLANT

V.M. Becerra^a; R.K.H. Galvão^b; J.M.F. Calado^c; P.M. Silva^c

^a The University of Reading Department of Cybernetic, Whiteknights Reading RG6 6AY, United Kingdom, e-mail: v.m.becerra@reading.ac.uk.

^b ITA Div. Eng. Electrónica São José dos Campos - SP Brazil, e-mail: kawakami@ele.ita.br.

^c 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.: +351 218 317 083, Fax: + 351 218 317 057, e-mail: jcalado@dem.isel.ipl.pt, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: psilva@dem.isel.ipl.pt,

Publicado em: *Actas do WCCI'02 - World Congress on Computational Intelligence, Honolulu, Hawaii, Maio 2002.*

A nonlinear regression structure comprising a wavelet network and a linear term is proposed for system identification. The theoretical

foundation of the approach is laid by proving that radial wavelets are orthogonal to linear functions. A constructive procedure for building such models is described and the approach is tested with experimental data.

LIQUID FILM DISINTEGRATION REGIMES AND PROPOSED CORRELATIONS

Isabel S. Carvalho^a; Manuel V. Heitor^b; Dina Santos^c

^a Dept. of Mechanical Engineering, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1950 – 062 Lisbon, Portugal, e-mail: icarvalho@dem.isel.ipl.pt

^b Dept. of Mechanical Engineering, Instituto Superior Técnico, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisbon, Portugal

^c PROET-Proyectos, Engenharia e Tecnologia S.A., Grupo EDP, Av E.U.A., 55, 1749-061 Lisbon, Portugal

Publicado em: *International Journal of Multiphase Flows*, Vol. 28, No. 5, pp.773-789.

The process of liquid sheet disintegration and break-up into a spray is studied making use of a flat liquid film surrounded by two air streams. The work considers a 2-D liquid film with an aspect ratio of 114 and a liquid velocity between 0.7 and 6.4 m/s ($543 \leq Re_L \leq 4963$) and an air velocity up to 39 m/s ($Re_g \leq 17647$), and allows the study of basic phenomena typical of airblast atomisation. The results include the quantification of instability amplitudes, break-up lengths and frequencies for the above-mentioned range of liquid (water) and air flow velocities. Three different experimental techniques are used: back light and laser light sheet illumination, are used to measure the instability amplitudes, which leads to the liquid film disintegration and the spray formation; strobelight illumination, for the quantification of either break-up lengths and frequencies, and; a laser attenuation technique for frequency measurements and comparison with the visualisation technique. The results quantify the range of application of the different techniques, and include an analysis of the liquid disintegration process as function of the liquid velocity when exposed to different air flow velocities, along with the quantification of break-up lengths, disintegration frequencies and spray angles, and show that the disintegration of the liquid sheet is associated with a periodic process, which is mainly dependent on the absolute air velocity and the air-liquid momentum ratio. Correlations are proposed for liquid sheet break-up length and frequency based on the air-to-liquid momentum ratio.

SUBSTÂNCIAS PERIGOSAS: AVALIAÇÃO DOS EFEITOS E CLASSIFICAÇÃO PARA A SAÚDE HUMANA E O AMBIENTE; EMBALAGEM E ROTULAGEM – ACTUALIZAÇÃO DE LEGISLAÇÃO

Rui M. F. Simões^{a,b}

^a Eq. Professor Adjunto, Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Engenharia Industrial (*Higiene e Segurança Industrial*), Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, e-mail: rsimoes@dem.isel.ipl.pt

^b Chefe da Divisão de Riscos Industriais, Instituto do Ambiente, Rua da murgueira, 9/9A – Zambujal, 272-865 Amadora, Portugal, e-mail: rui.simoies@iambiente.pt

Publicado em: *Segurança*. 148. pp 29-33. Lisboa. Maio/Junho 2002.

Numa primeira parte, explicita-se o enquadramento legal (nacional e comunitário) respeitante à classificação, embalagem e rotulagens das *novas substâncias* e das *substâncias existentes* colocadas à disposição de terceiros ou no mercado da Comunidade Europeia.

De seguida, apresenta-se a legislação nacional constante do Decreto-Lei nº 82/95 e do *Regulamento para a Notificação de Novas Substâncias Químicas e para a Classificação, Embalagem e Rotulagem de Substâncias Perigosas* – Portaria nº 732-A/96 de 11 de Dezembro, na sua redacção actual, à data, os quais transpõem a Directiva 67/548/CEE (nas suas, até então, oito alterações ou modificações e vinte e sete adaptações ao progresso técnico).

UTILIZAÇÃO DOS COMPÓSITOS FABRICADOS PELO MÉTODO RTM NAS CONSTRUÇÕES AEROSPACIAIS

Z. Dimitrovová^b, J. M. C. Travassos^a

^a Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Projecto Mecânico, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 013, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: leite@dem.isel.ipl.pt, e-mail: joaot@dem.isel.ipl.pt.

^b IDMEC, Instituto de Engenharia Mecânica, Tel.: + 351 218 419 462, Fax: + 351 218 417 915, e-mail: zdimitro@dem.ist.utl.pt /Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, e-mail: zuzana@dem.isel.ipl.pt.

Publicado em: CCTE - *CD-ROM das comunicações de Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Os compósitos reforçados por fibras formam uma classe importante de materiais de engenharia, devido à possibilidade de costurar as suas propriedades de acordo com as exigências industriais e devido ao desenvolvimento de processos eficientes da sua fabricação. O processo chamado Resin Transfer Molding (RTM ou Moldação por Transferência de Resina) tornou-se nas últimas três décadas, um dos mais populares métodos de fabricação deles. Neste trabalho apresentam-se três casos da nova implementação das peças RTM nas construções aerospaciais e mostra-se a simulação numérica do processo de enchimento deles.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO COMPORTAMENTO DE VIGAS EM T

A. M. C. S. Leite^a; A. P. F. Silva^b; J. M. C. Travassos^a

^a Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Projecto Mecânico, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 013, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: leite@dem.isel.ipl.pt, e-mail: joaot@dem.isel.ipl.pt.

^b Universidade técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Projecto Mecânico, Av. Rovisco Pais, 1049-001 Lisboa, Portugal, Tel.: + 351 218 417 471, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: asilva@alfa.ist.utl.pt, Tel.: + 351 218 417 723, Fax: + 351 218 417 915.

Publicado em: *Livro e CD-ROM de resumos da CCTE 2002 – Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Uma viga em T de compósitos de carbono e vidro e outra metálica, foram submetidas a um esforço de flexão, sendo as vigas aparafusadas nos seus extremos. Cada tipo de viga foi instrumentada com extensómetros na alma e na flange. Foi efectuada a comparação dos resultados assim obtidos com os respeitantes aos modelos de elementos finitos, verificando-se uma boa concordância entre os resultados.

STATE-OF-ART DA DETECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE AVARIAS EM PROCESSOS INDUSTRIAIS

M. J. G. C. Mendes

Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Estudos de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1950-062 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: mmendes@dem.isel.ipl.pt

Publicado em: *Actas da CCTE'2002 – Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia no ISEL, CD-ROM, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Ao longo das últimas décadas tem havido um interesse crescente, por parte da indústria e da comunidade académica, pelos sistemas de detecção e diagnóstico de avarias (sistemas FDI). A crescente complexidade dos processos e do seu controlo, assim como a necessidade de tornar os processos mais seguros e fiáveis incentivou a procura e desenvolvimento de sistemas FDI. O desenvolvimento e melhoria deste tipo de sistemas seguiu de perto a evolução na tecnologia, nomeadamente a evolução informática, que permitiu maior facilidade na análise de grandes quantidades de dados e aplicação de sistemas FDI em tempo real. Este artigo pretende fazer um ponto da situação, a nível mundial, desta área de investigação.

A FAULT DETECTION APPROACH BASED ON FUZZY QUALITATIVE REASONING

J. M. F. Calado^a, F. P. N. F. Carreira^a, M. J. G. C. Mendes^a, 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, 1950-062 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 040, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: {fcarreira, 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.: + 351 218 417 187, Fax: + 351 218 498 097, e-mail: sadacosta@dem.ist.utl.pt

Publicado em: *Actas da 4th DAMADICS Workshop – Qualitative Approach for Fault Diagnosis, Bochum, Alemanha, Maio 2002.*

A fault detection methodology based on a fuzzy qualitative simulation algorithm is described in this paper. The adoption of fuzzy sets allows a more detailed description of physical variables, through an arbitrary, but finite, discretisation of the quantity space. The fuzzy representation of qualitative values is more general than ordinary interval representation, since it can represent not only the information stated by a well defined real interval but also the knowledge embedded in the soft boundaries of the interval. Such a methodology was applied to a pneumatic servomotor actuated control valve.

PRODUÇÃO E GESTÃO DE DOCUMENTAÇÃO TÉCNICA UMA ABORDAGEM

Maciel Vieitas; Paranhos Teixeira; Martins Paulino

Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal

Publicado em: CCTE - *CD-ROM das comunicações de Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, ISEL, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

A produção de documentação técnica em Engenharia Mecânica está em íntima ligação com o projecto e o desenho técnico assume papel relevante.

O texto que se apresenta visa salientar a evolução da representação desde os primeiros tempos com Leonardo da Vinci até à actualidade, inspirada em computadores , sempre em inovação e a ritmos cada vez mais exigentes.

Numa escola de Engenharia que se pretenda moderna terá que desenvolver o acto pedagógico apoiado em didácticas que acompanhem a evolutiva inovação. O Departamento de Engenharia Mecânica, tem vindo a fazer um esforço no sentido de se equipar de forma a responder aos desafios que se lhe colocam.

A presente abordagem tem por objectivo mostrar o que neste domínio da mecânica se faz no ISEL.

CORRECÇÃO DO PERFIL DE RADIAÇÃO SOLAR INCIDENTE NAS JANELAS DO EDIFÍCIO A CLIMATIZAR

J.M.F. Gaspar; F.M.F. Severo

Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 000, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: jgaspar@dem.isel.ipl.pt, e-mail: francisco.severo@esteproar.pt.

Publicado em: *Comunicações Técnicas – Encontro Refrigeração/Climatização, Ensino Superior, I AVACR-ESUP , Lisboa, Portugal, Abril de 2002.*

Os programas informáticos usados para efectuar o balanço de energia em edifícios a climatizar baseiam-se em modelos teóricos que, por vezes, necessitam de sofrer correcções para os aproximar da realidade.

O ganho de energia de radiação solar nos edifícios baseia-se num modelo de Céu Limpo (ASHRAE). A correcção é feita no programa, por um factor “multiplier” e de limpidez da atmosfera - ACN.

Neste trabalho apresenta-se uma equação (modelo do Céu Nublado) que permite determinar o factor de correcção.

O multiplicador é determinado por coeficientes ou índices de nebulosidade, fornecidos por satélite (Projecto Satellight) ou pelo método tradicional. Os dados fornecidos por satélite (Meteosat) podem ser obtidos pela “Internet”.

O factor ACN é determinado pela correlação entre os valores de radiação solar calculados para céu limpo e os reais obtidos por leitura à superfície. Com este trabalho pretende-se demonstrar que os modelos teóricos abstraídos da realidade nunca podem ficar desligados da mesma. Ao efectuar um projecto é importante visualizar fisicamente aquilo que está a ser feito no decorrer do mesmo, afim de evitar o tal distanciamento da realidade, quando se usam concepções, generalizações e simplificações.

SEGURANÇA E AMBIENTE - RISCOS EXCEPCIONAIS: O NOVO REGIME DA PREVENÇÃO E CONTROLO DOS PERIGOS ASSOCIADOS A ACIDENTES GRAVES QUE ENVOLVEM SUBSTÂNCIAS PERIGOSAS.

Rui M. F. Simões^{a b}

^a Eq. Professor Adjunto, Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Engenharia Industrial (*Higiene e Segurança Industrial*), Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, e-mail: rsimoes@dem.isel.ipl.pt

^b Chefe da Divisão de Riscos Industriais, Instituto do Ambiente, Rua da murgueira, 9/9A – Zambujal, 272-865 Amadora, Portugal, e-mail: rui.simoes@iambiente.pt

Publicado em: *Segurança*. 147. pp 24-33. Lisboa. Março/Abril 2002.

Apresenta-se o novo quadro regulamentar e técnico respeitante à prevenção e controlo dos riscos de grandes acidentes químicos (Decreto-Lei nº 164/2001, de 28 de Maio, que transpõe a Directiva comunitária nº 96/82/CE, dita *Seveso II*), detalhando-se em particular os aspectos respeitantes às obrigações de prevenção, com particular enfoque nas disposições técnicas e institucionais.

Após enquadramento histórico, tanto nacional como comunitário, salientam-se os aspectos inovadores bem como as novas autoridades competentes nacionais (Instituto do Ambiente e Protecção Civil).

Detalham-se o campo de aplicação e as obrigações técnicas (*Notificação, Relatório de Segurança, comunicação de acidentes graves*) e de organização (*Política de Prevenção de Acidentes Graves e Sistema de Gestão da Segurança*) dos operadores. Passa-se, de seguida, em revista todo o conjunto das disposições de carácter técnico, relevante na perspectiva dos operadores responsáveis pelos estabelecimentos abrangidos.

FAULT DETECTION USING NEURO-FUZZY NETWORKS

M. Kowal^a, J. Korbicz^a, M. J. G. C. Mendes^b; J. M. F. Calado^b

^a 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: J.Korbicz@issi.uz.zgora.pl

^b Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Estudos de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1950-062 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

Publicado em: *Systems Science Journal*, Vol. 28, n.º 1, pp. 45-57, 2002.

Generally three methodologies to develop and test fault detection (FD) algorithms can be distinguished: software benches, hardware benches and industrial data. The current approach uses a hardware bench that consists of process under supervision (two interconnected stations), supervision unit, fault diagnosis unit and fault simulation unit. All elements of the bench are connected to a PROFIBUS network that acts as the communication system exchanging information between automation system and distributed field devices. A realistic and flexible environment for developing and testing FD systems has been constructed using elements commonly used in industry. During the current studies actuator faults, sensor faults and leakages have been considered as incipient and abrupt faults. The proposed FD algorithm bases on neuro-fuzzy models that are responsible for residual generation.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO COMPORTAMENTO DE ESTRUTURAS EM MATERIAIS COMPÓSITOS

A. Pedradas^a, Z. Dimitrovová^b, J. M. C. Travassos^a

^a Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Secção de Projecto Mecânico, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, Tel.: +351 218 317 013, Fax: + 351 218 317 213, e-mail: leite@dem.isel.ipl.pt, e-mail: joaot@dem.isel.ipl.pt.

^b IDMEC, Instituto de Engenharia Mecânica, Tel.: + 351 218 419 462, Fax: + 351 218 417 915, e-mail: zdimitro@dem.ist.utl.pt /Instituto Politécnico de Lisboa, Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Departamento de Engenharia Mecânica, Rua Conselheiro Emídio Navarro, 1949-014 Lisboa, Portugal, e-mail: zuzana@dem.isel.ipl.pt,

Publicado em: *Mecânica Experimental*, n.º 8, 2002.

O objectivo do presente trabalho consiste na optimização do material compósito usado na casca reforçada, visando a redução de custos de fabrico e a maximização da resistência à fadiga. A maior parte deste trabalho está a ser desenvolvida por alunos, no âmbito de trabalhos de fim do curso de licenciatura em engenharia mecânica do Instituto Superior de Engenharia de Lisboa (ISEL). É assim possível com recurso a software avançado e à experimentação, participar no desenvolvimento de produtos com interesse para a indústria.

PROTECÇÃO CATÓDICA: UMA APLICAÇÃO NO GASODUTO TRANSGÁS

J.A. Rocha A. Soares, Eq. Prof. Adjunto do ISEL

Mestrado em: *Manutenção Industrial.*

Grau concedido por: *Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.*

Orientador: *Professor Doutor Queiroz de Melo, Prof. Associado da FEUP.*

Co-Orientador: *Professor Engº Dias Lopes, Eq. Prof. Adjunto do ISEL.*

Provas Concluídas em: *5 de Novembro de 2002.*

O sistema de transporte de gás natural em alta pressão que abastece Portugal, desenvolve-se através de uma rede de gasodutos de aço carbono de alta resistência, unidos pelo processo de soldadura eléctrica manual com eléctrodo revestido.

A Construção desta Rede de 1200 quilómetros de extensão, implicou a utilização de uma faixa de terreno de 20 e 15 metros de largura, função do diâmetro da tubagem de 0,7/0,5/0,3 metros respectivamente, solos esses com características de resistividade variáveis, onde a tubagem após o processo de soldadura foi “enterrada” a uma profundidade mínima do solo de 1 metro da geratriz do tubo.

A implementação deste projecto estruturante e estratégico, na oferta de alternativas energéticas em termos ambientais favoráveis á economia portuguesa, tem resultado num elevado investimento financeiro.

A manutenção deste importante Projecto nacional, implica pelas suas características específicas de construção e operação; o planeamento, implementação e controlo de processos tecnológicos e meios humanos altamente especializados.

Embora a situação actual de regulamentação do sector energético do gás natural, tenha permitido a utilização dos solos de passagem do gasoduto da Transgás, estabelecido em decreto-lei, e a sua implementação tenha sido bem sucedida, não implica que hajam 1200 quilómetros de terreno a que a Manutenção da Transgás tenha de responder com sucesso, sob pena que as expectativas criadas aos consumidores, de não interrupção de fornecimento de GN, não se verifique por motivo de não garantia da qualidade das infra-estruturas do gasoduto.

Na fase de construção em duas zonas distintas Monforte e Mortágua, ocorreram situações de cargas externas sobre a vala do gasoduto resultantes da acção do rodado de veículos pesados, que acidentalmente invadiram esta área reservada; cargas essas que ultrapassaram o limite de elasticidade do aço dos tubos, resultando face ao código e legislação aplicáveis situações de não conformidade, que posteriormente foram eliminados através de processos adequados de garantia da qualidade.

A investigação aqui proposta pelo autor, como extensão do trabalho apresentado assenta num modelo empírico à escala laboratorial, onde foi testada uma secção do gasoduto idêntica a uma das situações acima expostas, tendo por base o código internacional aplicável. Analisando-se

através da aplicação de cargas (concentradas) normalizadas as deformações no tubo, recolhidas e interpretadas por extensometria eléctrica e posteriormente analisadas através de modelação por elementos finitos.

O resultado desta investigação tem como objectivo, de em situações de carregamento externo da tubagem do gasoduto, por invasão acidental da zona de passagem deste, ser previsível a existência ou não de deformação no tubo, e perante o código internacional aplicável ser tomada a decisão, em conjunto com meios de controlo não destrutivo (passagem de “pigs”), do procedimento de manutenção adequado, de forma a ser mantida a segurança da infra-estrutura, disponibilidade de abastecimento de gás natural e a consequente fiabilidade nos compromissos comerciais e ambientais da Transgás.

DETERMINAÇÃO DO TEOR EM CHUMBO NUMA MATRIZ AMBIENTAL POR VOLTAMETRIA DE REDISSOLUÇÃO ANÓDICA.

M. I. S. Lopes,^a N. A. F. Silva,^b R. A. E. Leitão,^b M. J. Matos^b

^aDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal E-mail: nsilva@deq.isel.pt

Publicado em: *Livro de Resumos do XVIII Encontro da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, Março de 2002.*

A Voltametria de Redissolução Anódica (ASV) é uma técnica baseada em princípios electroquímicos que tem vindo, nos últimos anos, a desempenhar um papel de destaque no campo da electroanálise química. A elevada sensibilidade, a detecção de espécies vestigiais, a portabilidade do equipamento e o seu custo não muito elevado, são alguns dos aspectos que justificam tal relevância.

A ASV apresenta um largo espectro de aplicações sendo que a grande contribuição deste método se observa ao nível da determinação de metais pesados em diversas matrizes, que vão desde as ambientais, até às industriais, passando pelas matrizes clínicas e biológicas.

Procuramos com este trabalho perspectivar a viabilidade da utilização da ASV em procedimentos de controlo ou monitorização de níveis de poluição ambiental por metais tóxicos, nomeadamente a aplicação à determinação do teor em chumbo numa matriz de origem ambiental (folhas do choupo recolhidas nas cidade de Lisboa).

O tratamento prévio da amostra inicia-se com uma secagem em estufa (48h a 60-65°C), seguida de um processo de trituração até se obter um pó tão fino quanto possível. Por fim, cerca de 2g são pesados rigorosamente e é efectuada uma digestão ácida, por microondas, com o objectivo de eliminar a matéria orgânica. O resíduo é, então, dissolvido com HNO₃ 1M, filtrado e diluído a 100 mL em tampão acetato 0.1M + KNO₃ 0.05M..

A determinação do teor em chumbo é efectuada pelo método da curva de calibração, onde se representa a altura de pico (μ A) em função da concentração de espécie electroactiva.

IMPLEMENTAÇÃO DE MEDIDAS DE SEGURANÇA INTEGRADA EM LABORATÓRIOS DE ANÁLISE QUÍMICA

Vitor J. M. Borges, Nelson A. F. Silva, Hugo F. Silva, M. Celeste C. Serra,
M. Isabel Godinho, Manuel J. Matos

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Portugal E-mail: vborges@deq.isel.ipl.pt

Publicado em: *Livro de Resumos do XVIII Encontro da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, Março de 2002.*

Nas sociedades modernas, a influência das condições de trabalho na vida dos trabalhadores e na produtividade e competitividade das empresas tem sido gradualmente reconhecida. Esta lógica pode também ser aplicada à vida académica e às condições de trabalho de alunos, docentes e técnicos em que se pretende melhorar o binómio ensino/aprendizagem e eficiência das instituições.

No contexto académico, nomeadamente nos cursos com vertente laboratorial nas áreas da química, biologia, física e outros, os vários intervenientes no processo educativo estão sujeitos a diversos riscos que poderemos considerar como riscos profissionais. Num laboratório típico de Análise Química, alunos, docentes e funcionários não docentes estão sujeitos a diversos riscos e perigos, como por exemplo, manuseamento de produtos químicos, incêndio, explosão e riscos eléctricos.

No sentido de aplicar no nosso laboratório uma política integrada de prevenção de acidentes, definimos algumas medidas a implementar. Numa primeira etapa, apetrechou-se o laboratório dos equipamentos básicos de protecção e de utilização em situação de acidente, como são os casos dos detectores e alarmes de gases, aplicação de chuveiros e lava-olhos, manutenção programada dos extintores, mantas anti-fogo e caixa de primeiros socorros. A etapa seguinte tem por objectivo envolver todos os intervenientes numa lógica de consciencialização, informação e atitude responsável. Por fim, e com carácter obrigatório, e definimos algumas regras a aplicar a todos os utilizadores deste laboratório que aumentaram o seu grau de segurança integrada.

Com estas medidas implementou-se um esquema de segurança mais adequado aos riscos presentes nas aulas laboratoriais de química, levando

também os alunos essa “herança formativa” para as suas futuras actividades profissionais.

NOVOS COMPLEXOS OCTAÉDRICOS DE FERRO(II): SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO

António P. S. Teixeira,^{a,b} M. Paula Robalo,^{a,b} M. Helena Garcia,^{a,c} e A.R. Dias^a

^aCentro de Química Estrutural, Complexo I, I.S.T., Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química, Universidade de Évora, Évora, Portugal

^cDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, Março 2002.*

A Química Organometálica tem emergido nos últimos anos como uma área de investigação bastante promissora na exploração de novas variáveis para a elaboração de materiais moleculares com potenciais aplicações em Óptica Não-Linear (NLO).

Estudos recentes em complexos octaédricos de metais de transição, nomeadamente do tipo $[M(PP)_2(L)Cl]$ ou $[M(PP)_2(L)_2]$ ($M=Ru(II)$, PP =fosfinas bidentadas, L =ligandos acetileno) revelaram propriedades interessantes na área da NLO. A incorporação do metal de transição no esqueleto conjugado do cromóforo e a possibilidade de aumentar a extensão dessa conjugação por modificação das características electrónicas do centro metálico e do próprio cromóforo, podem constituir factores importantes para as propriedades de NLO destes compostos.

Os estudos espectroscópicos dos primeiros complexos octaédricos de ferro(II) sintetizados contendo fosfinas bidentadas e benzonitrilos *para*-substituídos mostraram tratar-se de uma família interessante em termos de potenciais propriedades de óptica não-linear.

Na continuação deste trabalho, sintetizaram-se novos complexos octaédricos de ferro(II) do tipo $[FeX(P_P)_2(NCR)](PF_6)$, com $X=Cl, I$; $P_P=dppen, odppb$; e $R=(E)- (CH=CH)_n C_6H_4NO_2$ ($n=0, 1$) ou $(E)- C_6H_4CH=CHC_6H_4NO_2$.

Os novos complexos foram totalmente caracterizados pelas técnicas espectroscópicas habituais. Os resultados espectroscópicos de IV, 1H , ^{13}C e ^{31}P RMN são analisados com o objectivo de avaliar a riqueza electrónica do centro metálico na presença dos diferentes ligandos.

A identificação de bandas de transferência de carga metal-ligando (MLCT) de baixa energia, nos espectros de UV/Visível dos complexos

estudados, sugere a existência de propriedades de NLO, baseadas no envolvimento do fragmento metálico no sistema π do cromóforo, por retrodoação metal-ligando.

SÍNTESE DE BROMETOS DE ALQUILO TERCIÁRIOS

Luís Moreira,^a Filomena Martins,^a Ruben Elvas Leitão,^b Susana Santos,^a Eduarda Araújo,^a Paula Robalo^c

^aDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cCentro de Química Estrutural, Complexo I, I.S.T., Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, Março 2002.*

Na sequência de estudos cinéticos envolvendo compostos halogenados terciários e solventes hidroxílicos e pretendendo aumentar a matriz dos substratos halogenados utilizados, deparámo-nos com a inexistência comercial de alguns dos substratos requeridos. Foi assim decidido obtê-los em laboratório e inadvertidamente partimos para uma *aventura* cujos contornos não antecipávamos à data.

Por forma a sintetizar os compostos, iniciámos uma pesquisa bibliográfica nas fontes tradicionais, com vista a uma compilação das vias de síntese mais adequadas ao nosso caso. Escolhido o percurso, a *praxis* parecia simples mas verificámos que os primeiros resultados analíticos obtidos foram ambíguos, inclusivamente à luz de uma análise espectroscópica cuidada por RMN.

A reprodutibilidade do processo de síntese parecia afectada por factores desconhecidos, uma vez que as variáveis tinham sido, julgava-se, devidamente controladas. O que tinha afinal corrido mal? Enveredou-se por uma análise sistemática das variáveis do processo, dos testes efectuados e dos resultados obtidos.

Nesta comunicação descrevem-se os passos da síntese, a metodologia utilizada, as dificuldades sentidas e as soluções adoptadas.

ESTUDO DO EFEITO DA INCORPORAÇÃO DE UM SUPORTE GRANULAR DE ARGILA EXPANDIDA PARA FIXAÇÃO DE BIOMASSA NA EFICIÊNCIA DO TRATAMENTO TERCIÁRIO DE ÁGUAS RESIDUAIS MUNICIPAIS EM LAGOAS DE ESTABILIZAÇÃO

Paula Cantinho,^a António M.F. Rodrigues^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Ciências e Engenharia do Ambiente, FCT-UNL, Monte de Caparica, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do 6º Congresso da Água, Porto, Portugal, Março 2002.*

O tratamento terciário de águas residuais municipais de modo a que sejam cumpridas normas de descarga/qualidade cada vez mais restritivas constitui um dos actuais desafios no domínio da protecção da qualidade dos recursos hídricos. As lagoas terciárias, ou de maturação, são uma das alternativas possíveis para conseguir a remoção efectiva de nutrientes inorgânicos das águas residuais, constituindo uma solução de tratamento terciário sustentável e bastante atractiva pelos baixos custos de manutenção e operação que lhe estão associados. No entanto, associado à biomassa microalgal suspensa, ocorre frequentemente um aumento na concentração de CBO e SS no efluente final das lagoas terciárias, que constitui uma importante limitação à sua utilização. Neste contexto, vem ultimamente adquirindo relevância o interesse pelo estudo de sistemas que explorem a utilização de biomassa microalgal fixa no tratamento terciário de efluentes. Com o presente trabalho procurou-se contribuir para o estudo da viabilidade de otimizar o tratamento terciário em lagoas de estabilização, pela introdução de um suporte adicional para fixação de biomassa microalgal. Foram realizados ensaios à escala laboratorial, utilizando como suporte adicional para fixação de biomassa um granulado comercial de argila expandida (GrAE), habitualmente utilizado como condicionador de solos para diversas culturas e que frequentemente exige a adição suplementar de nutrientes. Os resultados obtidos permitiram concluir, por um lado, que se verificaram boas potencialidades do suporte testado (GrAE) para o desenvolvimento do biofilme bacterioalgal e, por outro lado, que, com a sua introdução, se

verificou uma diminuição relevante das concentrações de SST, CQO e N-total no efluente final.

ESTUDO DAS INTERFASES $M^+ + xNH_3 \rightleftharpoons [M(NH_3)] + xe^-$ (M= Cu, Ni, Ag) POR CURVAS POTENCIOSTÁTICAS

A. Martins, N. Nunes, M. Matos, R. Elvas Leitão

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, Março 2002.*

O estudo dos processos de eléctrodo é uma das actividades de crescente importância na área da química, explicável, em parte, pela proximidade à dinâmica área dos materiais. É deste modo fundamental a aquisição de capacidades práticas neste campo, que permitam não só uma melhor compreensão das componentes teóricas subjacentes (velocidade, simetria, mecanismo), como também a aquisição de uma polivalência na resolução de problemas práticos neste domínio.

Este trabalho de estudo e caracterização de várias interfases metal/solução através do traçado de curvas potencioestáticas para a determinação de parâmetros cinéticos incluiu duas vertentes: A primeira consistiu na variação destes parâmetros com o tipo de eléctrodo e concentração do electrólito. Com este fim, utilizaram-se três tipos diferentes de eléctrodos - cobre, níquel e prata em soluções de amónia de diferentes concentrações (entre 0.1 e 1.0 mol L⁻¹). A segunda vertente consistiu na determinação dos mesmos parâmetros utilizando uma concentração fixa de amónia e variando a temperatura dos ensaios em intervalos de 5 °C (entre 25 e 55 °C) de forma a determinar as respectivas energias de activação.

Experimentalmente os eléctrodos utilizados foram blocos de cobre, níquel e prata, montados em resina, como eléctrodo de referência utilizou-se o eléctrodo saturado de calomelanos (ESC) comercial e como eléctrodo auxiliar um eléctrodo de platina com forma de fita em espiral. Os ensaios decorreram a temperaturas controladas através de um banho termoestático onde a célula se encontrava imersa. Todos os ensaios foram feitos sob agitação para garantir controlo por transferência de carga.

Antes de iniciar cada ensaio fez-se o desarejamento da solução de amónia com azoto tipo R durante 15 min.

Para reduzir o tempo de ensaios concebeu-se um sistema que registava semi-automaticamente a diferença de potencial e intensidade de corrente do sistema através de um computador, ligado por uma interface IEEE 488 ao voltímetro e ao amperímetro.

Os eléctrodos foram depois polarizados até 500 mV acima dos respectivos potenciais de equilíbrio, fazendo variar o potencial em 10 mV até 300 mV acima e 25 mV até final.

Os resultados obtidos permitem confirmar que este sistema permite alcançar os objectivos propostos visto terem sido observadas as variações dos parâmetros cinéticos com os diferentes tipos de eléctrodos, com as diferentes concentrações de electrólitos e às diferentes temperaturas.

DETERMINAÇÃO DO TEOR EM CINZAS EM VÁRIOS TIPOS DE MEL

M. Celeste Serra, Alice Catarino, Alda Maia, M. Isabel Godinho, Nair Alua

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XVIII Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química, Aveiro, Portugal, Março 2002.*

O mel é um produto biológico de composição química muito variável, a qual lhe confere características muito diversas. Esta diversidade deve-se a inúmeros factores, tais como: o tipo de flora, o clima e a natureza do solo, a raça das abelhas e o estado fisiológico das colmeias.

As análises físico-químicas realizadas em diferentes tipos de mel revestem-se do maior interesse em virtude de permitirem estudar a influência das condições ambientais na composição e na qualidade do mel. Por outro lado, se estes estudos forem efectuados em mel proveniente das várias regiões de Portugal será possível contribuir para uma melhoria na produção e comercialização deste produto no nosso país.

É neste âmbito que se inserem os estudos realizados nos Laboratórios da Secção de Controlo Analítico do ISEL, os quais têm como objectivo a pesquisa de elementos metálicos no mel, utilizando a técnica de espectrofotometria de absorção atómica com chama ou câmara de grafite.

Deste modo, foram recolhidas amostras de mel de diferentes origens, produzido em diversas regiões do país:

Multiflora, da região da Serra da Estrela, de Mértola e de Montemor;

Rosmaninho da Serra do Portel;

Trevo e de incenso dos Açores.

As amostras foram tratadas de modo a determinar o teor em cinzas por gravimetria. Os resultados obtidos encontram-se dentro do intervalo de valores referido na literatura, evidenciando, de um modo geral, uma maior percentagem em cinzas nas amostras de mel multiflora.

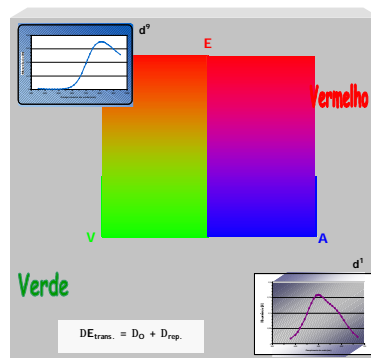
TRÊS VERTENTES DO ENSINO DE ENGENHARIA QUÍMICA NO ISEL

Maria Cândida M. Dias, Luísa Margarida R. Martins, Maria de Lourdes C. Matias, Elisabete C. B. Alegria, Vanda M. D. Pacheco, Magda C. Semedo

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

- Vertentes do Ensino Politécnico e/ou Universitário de Engenharia Química.
- Do IIL para o ISEL, a Componente Técnica do Ensino.
- Conteúdo Científico dos planos de reestruturação do Ensino no ISEL.
- Inovação no Ensino de Engenharia Química *versus* novas tecnologias.
- Experimentação avançada *on-line* no Ensino de Engenharia Química.



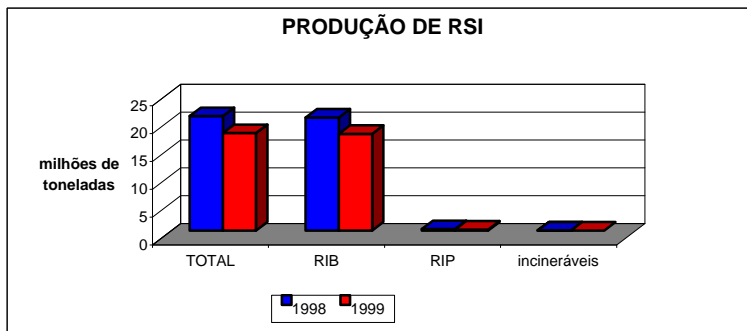
QUE SOLUÇÕES PARA O TRATAMENTO DE RESÍDUOS SÓLIDOS INDUSTRIAIS?

Jaime Filipe B. Puna

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

- Que estratégia para os Resíduos Sólidos Industriais (RSI)?
- Produção de RSI em Portugal.
- Métodos de tratamento de RSI.
- Incineração dedicada e co-incineração.
- Pirólise recorrendo à formação de plasma, com vitrificação.



MEDIDAS DE PROPRIEDADES ELÉCTRICAS DE NOVOS MATERIAIS ATRAVÉS DE MICROONDAS

Manuel J. Matos,^a Rui T. Henriques,^b Mario Poirier^c

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal, E-mail: mmatos@deq.isel.pt

^bDepartamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^cDépartement de Physique, Université de Sherbrooke, Canadá

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio de 2002.*

A concepção e síntese de novos materiais conduz geralmente à produção das primeiras amostras em quantidade e tamanho reduzido. Esta situação é típica no caso dos materiais orgânicos condutores em que se obtêm-se geralmente amostras cristalinas de tamanho reduzido. Nestas amostras é difícil a colocação de contactos para a medidas de propriedades

eléctricas. No caso dos compostos em estudo, ligas do condutor orgânico $(\text{per})_2[\text{M}(\text{mnt})_2]$ ($\text{M}=\text{Au}, \text{Pt}$), o tamanho médio das amostras obtidas foi cerca de $4 \times 0.1 \times 0.05 \text{ mm}^3$, enquanto que os melhores cristais atingiram os $7 \times 0.5 \times 0.01 \text{ mm}^3$. Tendo em conta estas dimensões e a fragilidade dos cristais, ensaiou-se a utilização de uma técnica em que as medidas de condutividade se realizam sem os habituais quatro contactos, utilizando-se em alternativa a radiação electromagnética (microondas). Esta técnica é excepcionalmente bem adaptada às pequenas amostras em forma de agulha como as por nós obtidas.

Foram medidas as magnetoresistências dos compostos puros de $(\text{per})_2[\text{Au}(\text{mnt})_2]$, $(\text{per})_2[\text{Pt}(\text{mnt})_2]$ e as ligas de $(\text{per})_2[\text{Pt}_x\text{Au}_{1-x}(\text{mnt})_2]$ com composições em platina de 2, 10, 15, 20 e 50%. Os campos magnéticos utilizados foram 5 e 10 T. Os resultados obtidos seguem aqueles obtidos pelo método tradicional dos quatro contactos. Face à validação dos resultados obtidos, este método parece-nos sem dúvida um método promissor para a medida de propriedades eléctricas em novos materiais condutores. A sua grande vantagem consiste em não requerer a colocação de contactos na amostra. O seu inconveniente são os seus custos de implementação e a operação delicada e exigente da montagem experimental. É um método ainda não disponível em Portugal mas que se espera poder aqui implementar a curto/médio prazo.

CARACTERIZAÇÃO BIOQUÍMICA DE QUEIJO E REQUEIJÃO DE CASTELO BRANCO

Maria Manuela Esteves,^a Ana Margarida Água-Doce,^b Maria Luísa Serralheiro^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bCentro de Estudos Bioquímicos e Fisiológicos, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

A maturação do Queijo é um processo que envolve uma série de processos bioquímicos complexos tais como a proteólise, lipólise e metabolismo da lactose e do ácido láctico.

A extensão e o tipo de maturação dependem do tempo e da temperatura de armazenamento, da composição do queijo (especialmente da

humidade e dos níveis de sal) e do tipo e actividades dos enzimas e microrganismos presentes.

As alterações químicas e físicas que ocorrem durante o processo de maturação vão determinar as qualidades organolépticas finais do queijo.

Embora as qualidades organolépticas finais do queijo sejam avaliadas a nível sensitivo, este método é um pouco subjectivo. Avaliação sensorial é importante para avaliar a qualidade do queijo antes de ser comercializado, mas mostra-se inadequada quando usada isoladamente para comparar resultados provenientes de diferentes laboratórios.

Por isso, usa-se normalmente análises químicas e físicas do queijo para monitorizar e acompanhar o processo de cura do queijo de um modo objectivo.

A indústria de lacticínios tem todo o interesse em desenvolver índices de maturação e de qualidade que possam complementar a análise sensorial, embora seja reconhecido que estes índices por si só não podem ser usados para a avaliar a qualidade do produto.

SÍNTESE ENZIMÁTICA DE ÁCIDOS HIDROXÂMICOS EM MICELAS INVERTIDAS

Rita Pacheco,^a Amin Karmali,^a Luísa Serralheiro^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bCentro de Estudos Bioquímicos e Fisiológicos, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

A utilização de enzimas como catalisadores de reacções de síntese de vários compostos de interesse industrial tem recebido considerável atenção devido às conhecidas vantagens que os enzimas apresentam relativamente a catalisadores químicos como a estereoespecificidade, a especificidade de substrato, o baixo consumo energético, entre outras.

De entre os vários produtos de interesse industrial podem-se referir os ácidos hidroxâmicos amplamente utilizados na indústria farmacêutica como constituintes de antibióticos, factores de crescimento e inibidores de tumores. Entre os diferentes enzimas capazes de realizar reacções de síntese destes ácidos hidroxâmicos encontra-se a amidase (acilamida amidohidrolase E.C. 3.5.1.4) de *Pseudomonas aeruginosa*.

Este enzima tem atraído atenções devido às variações na especificidade do substrato que se podem obter promovendo mutações no gene que o codifica, o que levará obviamente à obtenção de uma enorme variedade de produtos de síntese alguns dos quais com aplicação industrial.

Produziu-se amidase nativa da *Pseudomonas aeruginosa* por tecnologia de DNA recombinante em *E. coli*. As ferramentas de DNA recombinante há muito que são utilizadas por permitirem o controle e potenciação da síntese de enzimas e produtos que não são normalmente produzidos pelo microrganismo.

Após a produção em larga escala da amidase nativa desenvolveu-se um método expedito de purificação, um método que envolve poucas etapas no processo, mas com rendimento e grau de pureza elevado.

Procedeu-se ao estudo de um sistema em que a amidase pudesse ser utilizada para a catálise da reacção de síntese em estudo. Sistemas designados como não convencionais, como micelas invertidas têm-se revelado uma boa estratégia quando se pretende, por exemplo, realizar reacções de síntese.

Uma vez que se pretende utilizar o enzima amidase como catalisador na síntese de ligações amida, os sistemas de micelas invertidas parecem adequados pois a quantidade de água no sistema é reduzida fazendo deste modo a reacção de síntese favorecida face à reacção de hidrólise naturalmente catalisada pelo enzima.

Neste trabalho o enzima amidase de *P. aeruginosa* produzido pela *E. coli*, foi introduzido em micelas invertidas formadas pelo tensoactivo catiónico brometo de tetradeciltrimetilamónio em heptano/octanol. Para a actividade de síntese do composto em estudo determinou-se como sendo a melhor condição a formação de sistema de micelas invertidas com w_o 11, contendo 150 mM de tensoactivo e tampão fosfato 50 mM, pH 5. Neste estudo, o sistema de micelas invertidas revelou-se, como seria de esperar, vantajoso na catálise da reacção de síntese face á catálise desta reacção em solução aquosa. Enquanto que no sistema micelar se obtém um rendimento da reacção em estudo de 61% o rendimento em solução aquosa foi somente de 34%, ao fim de uma hora de reacção.

PRODUÇÃO, PURIFICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO PARCIAL DA LACCASE A PARTIR DE *Fusarium sp.*

Vanda Pacheco,^a Amin Karmali,^a Pablo Pereira,^b José Carlos Roseiro^b

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

A laccase (benzenodiol:oxigénio oxidoreductase; EC 1.10.3.2) catalisa a oxidação de vários compostos orgânicos acoplada à redução de oxigénio molecular em água. Esta enzima apresenta uma larga especificidade para o substrato redutor catalisando a oxidação de vários compostos aromáticos nomeadamente fenólicos. Este biocatalisador é sintetizado por várias plantas e fungos nomeadamente *Coriolus versicolor* e *Phlebia radiata*. A sua função metabólica consiste na decomposição de polímeros aromáticos naturais bem como a polimerização de produtos de oxidação e a degradação de substâncias xenobióticas. As laccases de origem fúngica desempenham um papel extremamente importante na biodegradação de compostos lenhocelulósicos sendo usadas na biodescolorização de águas de processo de tingimento e no desenvolvimento de biossensores com vista à quantificação de poluentes do ambiente e de metabolitos de interesse clínico.

O presente trabalho consistiu na produção de laccase a partir de uma estirpe de *Fusarium sp.* que foi isolada de uma amostra de terra de um pinhal de solo arenoso situado na Moita, Barreiro. Esta é a primeira vez que a produção da laccase a partir desta estirpe de *Fusarium sp.* é descrita e divulgada na comunidade científica. A estirpe fúngica foi cultivada num meio de cultura sólido contendo extracto de malte, peptona, glucose e agar a pH 5.5 e a 25°C durante uma semana. A produção da enzima foi efectuada num meio de cultura líquido contendo glucose, água de maceração de milho a 50% sólido (“corn-steep liquor”) e MgSO₄. A cultura fúngica foi desenvolvida numa incubadora com agitação orbital a 25°C e 200 rpm durante duas semanas. A laccase intracelular foi extraída do micélio obtendo-se a actividade máxima da enzima (26.5 IU/L de caldo de fermentação) no 10º. dia de crescimento com uma actividade específica de 0.143 IU/mg proteína.

A enzima foi purificada por cromatografia de afinidade com metal imobilizado (IMAC) em Sepharose 6B-epoxi-activada-IDA contendo Cu(II) a vários valores de pH. A preparação da enzima purificada apresentava uma actividade específica de cerca de 45 IU/ mg de proteína, um factor de purificação de 130 e um rendimento final de actividade

enzimática de 80%. A preparação da enzima purificada foi analisada por SDS-PAGE, PAGE nativa e filtração em gel em Sephacryl S-300 de forma a analisar as suas características.

A laccase apresentou um comportamento cromatográfico diferencial em relação aos quelatos de metal imobilizados obtendo-se uma adsorção total da enzima na coluna de Sepharose 6B-epoxi-activada-IDA-Cu(II) a pH 6.0, 7.0 e 8.0.

A enzima purificada foi usada com sucesso na oxidação de corantes de triazinas usados na indústria têxtil nomeadamente soluções de “Cibacron Blue”.

OPTIMIZAÇÃO DA PRODUÇÃO DA AMIDASE W138G DE *Pseudomonas aeruginosa* A PARTIR DE UMA ESTIRPE RECOMBINANTE DE *Escherichia coli*

Sónia Martins,^a Amin Karmali,^a Luísa Serralheiro^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

A amidase (EC 3.5.1.4) de *Pseudomonas aeruginosa* catalisa a hidrólise de amidas alifáticas produzindo o correspondente ácido e amónia. Esta enzima também catalisa a transferência de grupos acilo de amidas para a hidroxilamina produzindo ácidos hidroxâmicos. Estes compostos desempenham um papel importante na Indústria e na Medicina nomeadamente como factores de crescimentos, inibidores enzimáticos, agentes anti-cancerígenos e agentes quelantes no tratamento de efluentes industriais. Assim, é de enorme interesse o uso das amidases na síntese de vários ácidos hidroxâmicos de longa cadeia. A amidase tem atraído um grande interesse científico na medida em que é possível alterar a sua especificidade de substrato através de mutações na cadeia polipeptídica. Assim, recorre-se à técnica de mutagénesis dirigida do gene da amidase de *Pseudomonas aeruginosa* para a superprodução de amidases recombinantes alteradas com vista à produção de ácidos hidroxâmicos. A superprodução de enzimas pela tecnologia de DNA recombinante está dependente de vários factores nomeadamente vectores de expressão,

dosagem do gene, estabilidade do plasmídeo, selecção do hospedeiro microbiano e estabilidade do produto do gene clonado. De uma maneira geral, a proteína recombinante acumula no citoplasma das células de *Escherichia coli* sob a forma de agregados insolúveis denominados corpos de inclusão. Estes agregados consistem em formas intermédias de proteínas recombinantes parcialmente enroladas que estão biologicamente inactivas. A recuperação destas proteínas envolve a solubilização de agregados e a sua renaturação de forma a obter a proteína com enrolamento correcto e biologicamente activa. Alternativamente, é possível reduzir a formação de corpos de inclusão através da engenharia da fermentação da estirpe hospedeira recombinante.

O presente trabalho consistiu na optimização da produção de amidase W138G a partir de uma estirpe recombinante de *Escherichia coli* em termos de pH, temperatura, concentração de IPTG e arejamento. Seguidamente, procedeu-se à análise dos corpos de inclusão e sua recuperação através da solubilização e renaturação. A estirpe recombinante foi cultivada num meio de cultura sólido de Luria Bertani contendo ampicilina (125 µg/mL) a 37°C. A produção da enzima foi efectuada num meio de cultura líquido (Luria Bertani) contendo ampicilina (125 µg/mL) e concentrações adequadas de IPTG. A cultura foi desenvolvida numa incubadora com agitação orbital a temperaturas e agitação adequadas durante 20 h. A amidase intracelular foi extraída das células por desintegração ultrasónica e centrifugação obtendo-se a actividade da amidase no sobrenadante.

A produção máxima da amidase W138G (57.4 IU/L de caldo de fermentação com actividade específica de 0.904 IU/mg proteína) foi obtida nas seguintes condições experimentais: concentração de IPTG de 0.75 mM, pH 7.5 e à temperatura de 35°C. A formação de corpos de inclusão nos extractos celulares foi analisada quer por SDS-PAGE quer por PAGE nativa com detecção de actividade enzimática in situ. A solubilização dos corpos de inclusão foi efectuada em dois tampões diferentes: tampão Tris 0.1M contendo DTT 100 mM, benzamidina 1 mM, ureia 6 M a pH 8.0 e tampão tris 0.1M contendo DTT 100mM, benzamidina 1mM, guanidina-HCl 10 M e Triton X-100 5% a pH 8.0. Seguidamente, procedeu-se à renaturação da amidase usando dois tampões diferentes: tampão Tris 0.1 M contendo EDTA 5 mM, benzamidina 1 mM e D-glucosamina 10% a pH 8.5 e tampão Tris 0.1 M

contendo EDTA 5mM, benzamidina 1mM, glutatião oxidado 1 mM e glutatião na forma reduzida 5 mM a pH 8.5.

ACTIVAÇÃO DA AMIDASE T103I PELA HIDROXILAMINA A PARTIR DE UMA ESTIRPE RECOMBINANTE DE *Escherichia Coli*

Margarida da Silva,^a Amin Karmali,^a Luísa Serralheiro^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

A amidase (EC 3.5.1.4) é uma enzima indutível na estirpe selvagem de *Pseudomonas aeruginosa* 8602 permitindo a esta espécie a utilização de amidas simples como fonte única de carbono e azoto. Assim, estes substratos actuam como agentes indutores da síntese desta enzima. A amidase catalisa a hidrólise de amidas alifáticas produzindo o respectivo ácido orgânico e amónia. A utilização de agentes mutagénicos (raios UV e N-metil-N'-nitro-N-nitrosoguanina, entre outros) sobre a estirpe selvagem 8602 permitiu o isolamento de vários mutantes constitutivos produtores de amidases nomeadamente L10, AI3, Ph1 e AIU. A estirpe mutante AI3 sintetiza uma amidase alterada (T103I) que apresenta uma alteração na sua especificidade de substrato de enorme interesse comercial na medida em que actua quer sobre acetamida quer sobre p-nitroacetanilida e derivados. Assim, esta enzima poderá ser usada na síntese de péptidos que têm uma importante aplicação como neurotransmissores em Medicina.

O presente trabalho consistiu na produção da amidase T103I a partir de uma estirpe recombinante de *Escherichia coli*. Inicialmente, observou-se que a actividade específica do extracto celular da amidase T103I era extremamente baixa (0.0016 IU/mg de proteína). Contudo, a presença da hidroxilamina na mistura reaccional de doseamento da actividade enzimática aumentou dramaticamente a actividade da amidase T103I. O efeito activador da hidroxilamina sobre a actividade da amidase foi investigado através da variação da sua concentração (0-100 mM) na mistura reaccional. A activação máxima da amidase foi obtida a uma

concentração de hidroxilamina de 70 mM. Assim, a actividade específica da amidase foi de 0.347 e 0.0016 IU/mg de proteína na presença e na ausência de hidroxilamina, respectivamente. Neste trabalho, a actividade enzimática máxima foi de 97.6 IU/L de caldo de fermentação. Esta é a primeira vez que o efeito activador da hidroxilamina sobre a actividade da amidase T103I é descrito e divulgado numa comunicação científica.

A enzima recombinante sintetizada nesta estirpe hospedeira encontra-se predominantemente sob a forma de corpos de inclusão de acordo com a análise de SDS-PAGE e PAGE nativa. Os parâmetros físico-químicos de fermentação foram alterados de forma a reduzir a formação de corpos de inclusão nomeadamente arejamento, temperatura, pH, concentração de IPTG e composição do meio de cultura. Por outro lado, procedeu-se à solubilização dos corpos de inclusão e à sua renaturação usando os tampões Tris 0.1 M contendo 100mM DTT, benzamidina 1 mM e ureia 6 M a pH 8.0 e Tris 0.5 M contendo 5 mM EDTA, glutatião oxidado 1 mM e glutatião reduzido 5.0 mM a pH 8.5 .

FRACCIONAMENTO DO PLASMA COM ISOLAMENTO CROMATOGRÁFICO DE IMUNOGLOBULINA-G (IgG) E DA SUA SUBCLASSE IgG3

José Amaral

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Apresenta-se a estrutura e interesse da IgG e IgG3 nomeadamente na activação da cascata do complemento. Seguidamente, referem-se os principais processos conhecidos de Fraccionamento de Plasma: processo de precipitação em etanol e processo cromatográfico, utilizados em escala industrial, e processo electroforético ainda em escala piloto. São apresentados com maior desenvolvimento os processos de Cromatografia de Permuta Iónica (IgG) e Afinidade em Proteína A (IgG3). Resultados experimentais Laboratorial/Piloto: IgG, Factor Purificação 8 Rendimento 33%; IgG3 Pureza 99,5 % Rendimento 33%. Conclui-se assim no isolamento na Cromatografia de Afinidade em Proteína-A sobre a importância decisiva da força iónica na ligação das subclasses IgG 1,2 e

4 ao ligando Proteína-A permitindo o isolamento da IgG3 com uma pureza muito elevada. Salienta-se ainda a necessidade de otimizar o processo no que se refere ao controlo da temperatura, com vista à conservação da actividade do produto e assim ao aumento do rendimento do processo de isolamento.

Caracterização da Acidez da Superfície Externa de Zeólitos por XPS

J. M. Silva,^a M. F. Ribeiro,^b F. Ramôa Ribeiro^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

- H Zeólitos são utilizados como catalisadores para a isomerização de C8 aromáticos.
- Os centros ácidos da superfície podem ser importantes para a catálise.
- Os centros ácidos da superfície podem eliminar-se por tratamento com $(\text{NH}_4)_2\text{SiF}_6$.
- A adsorção de amoníaco seguida de quantificação por XPS caracteriza a acidez da superfície.
- A acidez da superfície é correlacionada com os resultados catalíticos.

AVALIAÇÃO E ACREDITAÇÃO - ENCONTROS E DESENCONTROS

Manuel J. Matos, M. Manuela Gonçalves, Helena Paulo, Carla Costa

ISEL, Lisboa, Portugal E-mail: mmatos@deq.isel.ipl.pt

Publicado em: *Livro de Resumos do XIV Congresso da Ordem dos Engenheiros, Coimbra, Portugal, Junho de 2002.*

O processo de avaliação dos cursos do Ensino Superior, determinado por Lei, e o processo voluntário para a acreditação dos cursos de Engenharia na Ordem dos Engenheiros têm um objectivo comum - garantir a qualidade dos diplomados. Embora as metodologias e os parâmetros de avaliação sejam distintos, são ambos processos periódicos que consomem

recursos humanos e técnicos bastante razoáveis. Aproximar as metodologias de Avaliação e de Acreditação com a criação de procedimentos comuns é um desafio que se coloca às instituições. Nesta comunicação serão indicadas pistas para a racionalização destes procedimentos. As indicações sugeridas referem-se à implementação de procedimentos comuns nas instituições mas também sugestões para as respectivas tutelas destes procedimentos: Entidades Representativas de Universidades e Politécnicos e Ordem dos Engenheiros.

A metodologia preconizada pelo Ministério de Educação orienta-se para uma avaliação da gestão dos recursos humanos, materiais e financeiros associada ao sucesso escolar, número de diplomados e, sua inserção profissional. Assim, tem subjacente grande preocupação com a opinião de todos os intervenientes no processo educativo, traduzido na necessidade de lançamento de diversos inquéritos de opinião.

A metodologia preconizada pela Ordem dos Engenheiros orienta-se na avaliação das capacidades e competências dos diplomados para o correcto desempenho da sua actividade profissional. São analisados o corpo docente, os conteúdos curriculares, organização do curso, ingresso e avaliação dos alunos, actividades de investigação e desenvolvimento realizadas, instalações e meios.

Os processos de Avaliação e Acreditação apresentam alguns aspectos comuns, cuja racionalização foi objecto de análise e cujas indicações para uma eficaz racionalização dos dois processos se apresentarão nesta comunicação.

ENGENHEIRO – MOTOR DA SOCIEDADE

B. Santos Baptista,^a V.M. Carrelhas^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bFórum Atlântico, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XIV Congresso da Ordem dos Engenheiros, Coimbra, Portugal, Junho de 2002.*

O Engenheiro, num mundo em permanente mutação, deve estar preparado para actuar ao mais alto nível de responsabilidade. Só o poderá fazer sendo um ente social com sólida formação técnica, capaz de caracterizar a situação, definir cenários de actuação, decidir e implementar a solução optimizada.

Pensamos que a sociedade, devido ao grande impacto mediático dos meios de comunicação – vide hipnóticos ecrãs televisivos, tem cedido ao facilitismo, bem representado no protagonismo fácil.

A sociedade, dentro da sua diversidade, deverá encontrar o equilíbrio que a conduza a patamares de desenvolvimento sustentável, onde o engenheiro deverá desempenhar um papel de primordial importância.

Sobre o ensino da engenharia é urgente fazer uma reflexão, no sentido de inverter os “focos negativos” que se abatem sobre a sociedade em geral, com evidentes repercursões no ensino superior, face ao acesso “indiscriminado” de alunos com percursos pouco satisfatórios no ensino secundário e quíçá no primeiro ciclo.

O drama da Matemática, com o seu “cortejo” de envio de grande parte dos alunos para a área das humanísticas já deu os seus maus frutos: excesso de pessoas com formação superior nesta área versus emprego e déficite de pessoas na área das ditas ciências exactas.

Associam-se a Física, a Química e mais recentemente a Filosofia e o próprio Português, como dificuldades de progressão dos nossos alunos na sua carreira académica.

O tempo urge:

O engenheiro, como motor da sociedade, deverá ser chamado a dar a sua contribuição na definição dos grandes objectivos nacionais que implicarão o consequente estabelecimento dos vectores que deverão nortear o ensino da Engenharia em Portugal.

CAUSAS DO INSUCESSO ESCOLAR NUM CURSO DE ENGENHARIA

Manuel J. Matos, Helena T. Avelino, Vítor M. Borges

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XIV Congresso da Ordem dos Engenheiros, Coimbra, Portugal, Junho de 2002.*

O ingresso no Ensino Superior no ano de 2001/2002 ficou marcado pelo facto de, pela primeira vez, o número de vagas disponíveis ser superior ao número de candidatos. Este é o sinal visível da massificação do ensino superior com inúmeras e indiscutíveis vantagens em termos de qualificação da população do país. Desvantagens também se encontram embora menos transversais em relação à diversidade dos cursos. O excesso de diplomados nalguns cursos e o crescente insucesso escolar

são dois exemplos prementes. Embora se trate de uma preocupação omnipresente nas instituições, o insucesso escolar no ensino superior tornou-se visível nos últimos anos e é até capaz de atrair a atenção dos jornais que não hesitaram em fazer dele manchetes de primeira página. Não será alheio a este facto o início do processo de avaliação das instituições bem como a acreditação dos cursos, nomeadamente aquela que é feita pela Ordem dos Engenheiros.

Neste estudo procurámos analisar com objectividade a opinião dos alunos sobre os motivos do seu insucesso escolar. Adoptou-se como metodologia a recolha de opiniões dos alunos do Curso de Engenharia Química do ISEL através de inquérito de respostas abertas. Foram inquiridos os alunos repetentes às disciplinas com uma taxa de sucesso inferior a 60% (número de alunos aprovados face aos alunos avaliados, não aos inscritos à disciplina). Identificaram-se 11 disciplinas nesta situação de entre as 64 que compõem o elenco do curso e todas elas dos primeiros semestres. A recolha de opiniões decorreu durante o processo de inscrição obrigatória nas turmas em Setembro de 2001. O processo foi acompanhado pela equipe discente da Comissão Pedagógica do curso com o objectivo de criar um clima de abertura e confiança e obter assim respostas exactas e não dissimuladas. O inquérito em si era bastante simples, tipificava a assiduidade do aluno, o nível de repetência e indicava três causas passíveis de se relacionarem com o insucesso escolar: o professor, a matéria leccionada e o próprio aluno. Para as causas escolhidas pelo aluno era pedido uma verbalização concisa e objectiva. Também existia a possibilidade de indicar outras causas não mencionadas como responsáveis pelo insucesso escolar. Ao indicar as três componentes principais do processo ensino/aprendizagem (emissor, mensagem e receptor) mas deixando cada uma das respostas em aberto acreditamos ter obtido resultados objectivos e exactos sem uma dispersão típica dos inquéritos de resposta completamente aberta. Os resultados do estudo permitiram desmistificar opiniões pré-concebidas sobre o insucesso escolar. Sobressai uma elevada capacidade de auto-crítica da parte dos alunos que assumem grande parte do ónus do insucesso escolar. É evidente a dependência directa entre o insucesso e a assiduidade às aulas, indicando os alunos a fraca assiduidade como causa primeira para o insucesso. Também para os docentes ficam pistas para uma futura acção nestes tempos de mudança do ensino superior em que inovadoras estratégias e posturas deverão emergir.

THE ROLE OF MUSHROOM NUTRITION AS A DELIVERY AGENT FOR ENZYME THERAPY IN CANCER CARE?-CHEMICAL AND BIOLOGICAL PROPERTIES IN MUSHROOM NUTRITION

Amin Karmali

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do 4th International Symposium on Mushroom nutrition – The use of Mushroom nutrition in Oncology, London, U.K., Junho 2002.*

Recently, mushrooms have become the target of studies trying to determine if fungi have nutritional benefits which could improve the body's immune function.

In Japan, when faced with a cancer patient, Japanese medical doctors not only use radical surgery, as well as radiation or chemotherapy, but also nutritional management (immunotherapy). The use of mushroom nutrition as part of nutritional management to enhance the body's immune function is considered standard practice in Japan and in other Asian cultures.

Several researchers have demonstrated that protein-bound polysaccharide complexes such as PSK or PSP, derived from *Coriolus versicolor* ; or Lentinan derived from *Lentinula edodes* are the most important component responsible for immunoenhancing and anti-tumour activities. In fact PSP is responsible for oxidative stress relief in cancer patients because it mimicks superoxide dismutase activity due to a small peptide (10KD) present in PSP.

Furthermore, it is a biological response modifier because it induces increased levels of gamma-interferon, interleukin-2, superoxide dismutase activity (SOD) and T-cell proliferation in experimental animals. On the other hand, SOD plays an important role in protecting cells against superoxide radical (O_2) damages and overproduction of O_2 *in vivo*.

However, other factors may be also involved in these biological processes which have not been fully investigated. Mushrooms contain a number of enzymes which may participate in several clinical conditions such as tumour and cancer invasion and cardiovascular disorders. It has been known that enzyme therapy plays an important role in several clinical conditions such as in cancer treatment, malignant lymphoma and cardiovascular disorders. These mushroom enzymes mentioned below

are thought to prevent oxidative stress as well as to inhibit cell growth in several diseases.

Upon analyzing the enzyme, protein and sugar content in *Coriolus versicolor*, *Cordyceps sinensis*, *Ganoderma lucidium* (Reishi) and *Grifola frondosa* (Maitake) we found the following results:

	Maitake	Reishi	Coriolus	Cordyceps
Enzyme, Protein and Sugar	MRL	MRL	MRL	MRL
Analysis Per Tablet of MRL Product				
1 Protein content	20.2 mg	22.2 mg	17.3 mg	8.4 mg
2 Reducing sugars	12.6 mg	24.0 mg	14.8 mg	265.6 mg*
3 Protein-bound polysaccharide	79.5 mg	69.5 mg	91.5 mg	82.1 mg
4 Peroxidase activity	40.2 mU	11.2 mU	67.2 mU	57.2 mU
5 Laccase activity	411.5 mU	451.5 mU	521.5 mU	-----
6 Glucoamylase / / Beta-glucansase activity	1.6U	2.7U	6.9U	-----
7 Protease activity	4.9 U	4.4 mU	5.9 U	5.6 U
8 Glucose 2-oxidase activity	-----	8.2 U	49.5 mU	-----

*Reduced sugars due to use of 200 mg of maltodextrin in Manufacturing process.

Background on the aforementioned enzymes is provided below:

a. Laccase (benzenediol:oxygen oxidoreductase; EC 1.10.3.2) is present in active form and catalyses the reduction of dioxygen to water as well as the oxidation of a wide range of phenolic and related compounds. This enzyme also catalyses the oxidation of 3-hydroxyanthranilic acid (3-HAA) into cinnabaric acid (CA) which is of great clinical interest because 3-HAA is produced in large quantities by interferon- γ primed mononuclear phagocytes. Furthermore, 3-HAA has been shown to act as a powerful scavenger of reactive oxygen species. On the other hand, cinnabaric acid (CA) is one of the major products of oxidation of 3-HAA suggesting that laccase may prevent oxidative damage in mammalian tissues. In a similar manner, the mammalian protein, ceruloplasmin which like laccase, is a member of the blue copper oxidase class of enzymes also catalysed the conversion of 3-HAA into CA.

On the other hand, this enzyme also plays an important role in biodegradation of environmental pollutants such as dechlorination of chlorophenolic compounds.

b. Pyranose oxidase also known as glucose 2 oxidase (pyranose:oxygen 2-oxidoreductase; EC 1.1.3.10) catalyses the oxidation of several aldopyranoses producing hydrogen peroxide and 2-keto-D-glucose. Several species of basidiomycetes express this enzyme which also catalyses one-electron reduction of several different classes of xenobiotic compounds. On the other hand, this enzyme plays an important role in clinical diagnosis of diabetes as well as in production of fine chemicals and antibiotics (i.e. corticosterone).

c. Peroxidases (EC 1.11.1.7) . These are a family of isoenzymes produced during the secondary metabolism in white-rot basidiomycetes. These enzymes catalyse hydrogen peroxide –dependent one-electron oxidation of a wide range of phenolic and related compounds which result in the formation of aryl cation radicals. These radicals are converted non-enzymatically in several end-products. There is a great interest in these enzymes because they can be used in the detoxification of a broad range of environmental pollutants namely PCBs and dioxins

d. Protease activity. The white-rot basidiomycete fungi *Coriolus versicolor* produces a significant amount of proteolytic activity. These fungi synthesize intracellular and extracellular proteases which are involved in the regulation of laccase and peroxidase activity in cultures of *Coriolus versicolor*. A protease is synthesized which cleaves protein substrates (i.e. fibrinogen and casein) specifically by hydrolysing some peptide bonds. This enzyme is of interest for two main reasons: First of all, it has a high fibrinolytic activity and hence it could be used as a potential therapeutic agent in the treatment of thrombosis. Secondly, this enzyme could be used in protein sequencing due to its unique specificity. Furthermore, mushrooms have been known to possess a large number of different secondary metabolites (i.e. lectins, terpenoids, antibiotics and metal chelating agents) which may play an important role in immune function of the host and hence could be used in immunotherapy of several pathological states.

Conclusions:

The immunotherapeutic properties in mushroom nutrition are due to the delivery of:

- i) protein-bound polysaccharide complexes responsible for immunoenhancing and anti-tumour activities;

ii) enzymes that both prevent oxidative stress and inhibit cell growth;

iii) secondary metabolites involved in several biological processes.

Further research is required to confirm whether mushroom nutrition delivers the enzymes and secondary metabolites, with "absorption" in the lower intestine or whether the presence of the enzyme activity and secondary metabolites in the digestive tract provokes a "sympathetic response" by body, providing the same therapeutic impact.

DETERMINAÇÃO DA ACIDEZ DO MEL CONTRIBUTOS PARA O ENSINO EXPERIMENTAL DA ANÁLISE QUÍMICA

A. Catarino, M. I. Godinho, N. Alua, A. Maia, A. R. Miranda, M. Silva, M. C. Serra

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XIV Congresso da Ordem dos Engenheiros, Coimbra, Portugal, Junho de 2002.*

As actuais preocupações com a qualidade dos alimentos têm contribuído para uma crescente aplicação de métodos de análise química. O contínuo desenvolvimento destes métodos tem conduzido a um conhecimento mais abrangente sobre a composição química dos alimentos, alertando para a eventual presença de elementos prejudiciais à saúde.

Nos laboratórios da Secção de Controlo Analítico do Departamento de Engenharia Química do ISEL está em curso um projecto de investigação no domínio da Análise Química de Alimentos. Numa primeira fase os estudos têm vindo a ser orientados para a pesquisa de elementos metálicos em mel, aplicando a técnica de espectrofotometria de absorção atómica.

No decurso dos ensaios e para uma caracterização adequada das amostras de mel, procedeu-se a determinações de acidez por potenciometria. Estas experiências revelaram-se, também, pedagogicamente interessantes de realizar nas aulas de laboratório de Análise Química uma vez que:

- Estimulam o interesse dos alunos;
- Ilustram as dificuldades associadas à manipulação de amostras naturais;
- Permitem uma aquisição rápida de resultados cujo tratamento em folha de cálculo Excel é possível de realizar durante a aula.

Deste modo, foi determinada a acidez de diversas amostra de mel monofloral produzido em Portugal. Os resultados obtidos encontram-se na gama de valores da literatura e permitiram estabelecer comparações entre os diferentes tipos de mel.

EFFECT OF A DIPOLAR SELF-ASSEMBLY MONOLAYER FORMATION ON INDIUM-TIN OXIDE ON THE PERFORMANCE OF SINGLE-LAYER POLYMER-BASED LIGHT-EMITTING DIODES

J. Morgado,^a A. Charas,^a N. Barbagallo,^a L. Alcácer,^a M. Matos,^b F. Cacialli^c

^aDepartamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal; E-mail: jmorgado@gcsi.ist.utl.pt

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cCavendish Laboratory, Cambridge and Dep. of Physics and Astronomy, University College London, London, UK

Publicado em: *Livro de Resumos do 21st Discussion Conference of P.M.M. and 9th International Conference ERPOS - Electrical and Related Properties of Polymers and Other Organic Solids, Praga, República Checa, Julho de 2002.*

We report on the effect of indium-tin oxide, ITO, surface modification on the electroluminescence efficiency and on the light-onset voltage, L^{on} , of single-layer light-emitting diodes, LEDs with aluminum cathodes. The modification involves the grafting of highly polar p-disubstitutedbenzene molecules creating a dipolar monolayer on the surface of ITO. This modification brings about an increase of the ITO workfunction and, therefore, a reduction of the barrier for hole injection into the HOMO of the luminescent polymers. The polar molecules possess -COCl or -SO₂Cl grafting groups and CF₃ or NO₂ as highly electronegative groups.

Poly[(2-methoxy-5-(2'-ethyl-hexyloxy)-1,4-phenylene vinylene), MEH-PPV, and polyfluorenes are used as luminescent polymers. We observe that the surface modification of ITO with these self-assembled monolayers, brings L^{on} down to about 2.2 eV, close to the energy gap voltage of MEH-PPV (≈ 2.13 eV), in spite of the low electron injection ability of the aluminum cathode. Correspondingly, the current flowing through the devices is significantly increased. Similar studies have been carried out in polyfluorene-based LEDs and the results will be reported.

CHEMICAL AND ELECTROCHEMICAL REACTIVITY OF A BISCYANAMIDE-DIHYDRIDE Mo COMPLEX

Elisabete C. B. do A. Alegria,^{a,b} Luísa M.D.R.S. Martins,^{a,b} João J.R. Fraústo da Silva^a and Armando J.L. Pombeiro^a

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts da XXth International Conference on Organometallic Chemistry, Corfu, Grécia, Julho 2002.*

In spite of the interest of cyanamide ($\text{N}\equiv\text{CNH}_2$), namely as a substrate of nitrogenases and in chemical syntheses, its coordination chemistry still remains little explored. In pursuit of our interest on its activation by coordination to a transition metal centre, we have obtained some cyanamide complexes of Mo, Re or Fe and now we report the reactions of the biscyanamide-dihydride Mo complex $[\text{MoH}_2(\text{NCNH}_2)_2(\text{dppe})_2]\text{[BF}_4\text{]}_2$ ($\text{dppe} = \text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2$) (which is obtained by reaction of $[\text{MoH}_4(\text{dppe})_2]$ with NCNH_2 in the presence of HBF_4) with bases or reducing agents such as $[\text{NBu}_4]\text{OH}$, KOH , K-selectride or LiBu^n , as well as its cyclic voltammetric behaviour.

Partial deprotonation and/or dehydrogenation occur both chemically and electrochemically and these reactions are presented and discussed on the basis of electronic effects and possible biological significance.

REACTIONS OF ALLENYLIDENE COMPLEXES OF IRON(II)

Ana I.F. Venâncio,^a Luísa M.D.R.S. Martins,^{a,b} João J.R. Fraústo da Silva^a and Armando J.L. Pombeiro^a

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts da XXth International Conference on Organometallic Chemistry, Corfu, Grécia, Julho 2002.*

Although the chemistry of transition-metal allenylidene complexes $[\text{M}]=\text{C}=\text{C}=\text{CR}_2$ is comparatively much less developed than that of the vinylidene derivatives, during the last years the interest in studying these highly unsaturated carbene species has notably increased.

We have previously synthesised and characterised the series of cationic allenylidene complexes *trans*-[Fe(Br)(=C=C=CR₁R₂)(depe)₂][BPh₄] (R₁, R₂ = alkyl or aryl; depe = (CH₃CH₂)₂PCH₂CH₂P(CH₂CH₃)₂) and now we report their reactions with formation of new alkynyl neutral derivatives, such as:

-*trans*-[Fe(Br){C≡CCPh₂(Y)}(depe)₂] (Y = H **1a** or OMe **1b**)

-*trans*-[Fe(Br){C≡CC(Ph)=CH₂}(depe)₂] **2** and *trans*-

[Fe(Br)(C≡CC(CH₃CH₂)=CHCH₃)(depe)₂] **3**.

These new complexes were obtained from nucleophilic attack by an hydride source, a methoxide salt and/or hydroxide to the appropriate allenylidene complexes. Their synthesis, spectroscopic and FAB-MS properties are presented and discussed.

ACTIVATION OF CYCLIC AND LINEAR ALKYNOLS BY PHOSPHINIC IRON(II) COMPLEXES

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

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts da 35th International Conference on Coordination Chemistry, Heidelberg, Alemanha, Julho 2002.*

Transition-metal allenylidene complexes (M=C=C=CR₁R₂) have attracted a great deal of attention in recent years as a new type of organometallic intermediates that may have unusual reactivity in stoichiometric and catalytic processes. In fact, these complexes are useful reagents in both homogeneous catalysis and organic synthesis namely due to their material properties which have potential capacity to behave as building blocks for the synthesis of unsaturated organic molecules and for the access to metal-containing copolymers. Moreover, in contrast to that of their vinylidene homologues, their chemistry is only beginning to be studied in detail.

In pursuit of our interest in these unsaturated compounds we have synthesised allenylidene complexes resulting from reaction of a phosphinic iron(II) complex with tertiary alkynols (*trans*-[Fe(Br)(=C=C=CR₁R₂)(depe)₂][Y] (R₁, R₂ = alkyl or aryl; depe = Et₂PCH₂CH₂PEt₂; Y = BF₄ or BPh₄) and now we report the synthesis and

characterisation of the cyclic allenylidene complexes *trans*-[Fe(Br)(L)(depe)₂][BPh₄] (L = CCC₆H₁₀, CCC₈H₁₄) and of the alkyne complexes *trans*-[Fe(Br)(L')(depe)₂][BPh₄] (L' = η²-HC≡C(CH₂)_nOH, n = 1 or 4) derived from the reaction of the appropriate alkynol with the above iron(II) complex.

Further preliminary reactivity towards nucleophiles is also discussed.

A DIFFUSE REFLECTANCE STUDY OF BENZIL INCLUSION COMPLEXES WITH *p*-tert-BUTYLCALIX[n]ARENES (n=4, 6 AND 8)

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

^aCentro de Química-Física Molecular - Complexo I, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cCentro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, FIOCRUZ, Rio de Janeiro, Brasil

Publicado em: *Livro de Resumos do XIX IUPAC Symposium on Photochemistry, Budapeste, Hungria, Julho 2002.*

Owing their characteristics and selectivity, calixarenes appear to be very useful support materials for photochemical studies. Diffuse reflectance and laser-induced techniques were used to access photochemical and photophysical processes of benzil in powdered solid hosts, namely *p*-tert-butylcalix[n]arenes (n=4, 6 and 8), which are organic substances capable of selectively forming inclusion complexes with different guests.

Benzil is an extremely useful molecule for probing new hosts. Being a β -dicarbonyl compound, it presents different conformations due to rotation of the central carbonyl-carbonyl bond in the ground and excited state. In the former case it has a non-planar (skew) conformation (twist angle of the two benzoyl moieties of about 72°). Upon excitation, in fluid media, both the first excited singlet state and the first excited triplet state have relaxed to an identical conformation, a *trans*-planar geometry in which the –CO–CO– dihedral angle is 180°. Therefore, both fluorescence and phosphorescence are dependent on external constraints imposed by the environment.

Time resolved phosphorescence spectra of inclusion complexes of benzil and *p*-tert-butylcalix[n]arenes with n=4, 6 and 8 have shown that benzil forms inclusion complexes with the two larger calixarenes and is deposited as microcrystals in the outside surface of calix[4]arene.

Triplet-triplet absorption of benzil was detected in all cases and is predominant in the calix[4]arene case. Benzil ketyl radical formation occurs with entrapment in cellulose and also with inclusion in calix[6]arene and calix[8]arene, although in a smaller extent.

POTENTIALITIES OF DIFFUSE REFLECTANCE LASER-INDUCED TECHNIQUES IN SOLID PHASE: A COMPARATIVE STUDY OF BENZOPHENONE INCLUSION WITHIN CALIX[N]ARENES, SILICALITE AND MICROCRYSTALLINE CELLULOSE.

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

^aCentro de Química-Física Molecular - Complexo I, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cCentro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, FIOCRUZ, Rio de Janeiro, Brasil

Publicado em: *Livro de Resumos do XIX IUPAC Symposium on Photochemistry, Budapeste, Hungria, Julho 2002.*

Diffuse reflectance and laser-induced techniques were used to access photochemical and photophysical processes in solid phases, namely with p-tert-butylcalix[n]arenes (n is the number of phenolic units in the ring), organic substances capable of forming inclusion complexes with several neutral molecules and metal ions. Recently we have used p-tert-butylcalix[4], [6] and [8]arenes as solid matrixes and benzophenone (BZP) as probe. A comparative study is presented here using the results obtained with calix[6]arene as host and with two other electronically inert supports: microcrystalline cellulose and silicalite, a hydrophobic zeolite. In all substrates, room temperature phosphorescence was obtained in air equilibrated samples. Decay times vary greatly, the largest lifetime being obtained for silicalite, where BZP is included into hydrophobic channels. Calix[6]arene and cellulose provide full protection against oxygen quenching, while silicalite only protects the guest molecule partially.

Calixarene molecules provide larger hydrophobic cavities than silicalite and also a better selectivity towards the guest size. This selectivity does not exist in microcrystalline cellulose.

FT-IR absorption spectra show that the distortion from planarity in the BZP molecule is larger in silicalite than in calix[6]arene, while in

cellulose the distortion is slight. In spite of this, BZP exhibits the highest phosphorescence emission quantum yield in the case of silicalite.

BZP ketyl radical formation occurs with entrapment in cellulose and also with inclusion in calix[6]arene, while in silicalite only triplet-triplet absorption is detected.

NEW OCTAHEDRAL COMPLEXES OF IRON(II) WITH AROMATIC ACETYLIDE AND NITRILE DERIVATIVES

M. Helena Garcia,^{a,b} M. Paula Robalo,^{a,c} António P.S. Teixeira,^{a,c} M. Teresa Duarte,^a M.F.M. Piedade^{a,b} and A.R. Dias^a

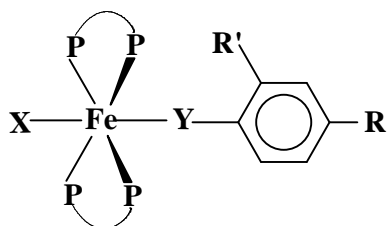
^aCentro de Química Estrutural, Complexo I, I.S.T., Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Química, Universidade de Évora, Évora, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts da XXth International Conference on Organometallic Chemistry, Corfu, Grécia, Julho 2002.*

The nonlinear optical (NLO) properties of organometallic complexes, namely Second Harmonic Generation (SHG), have been an emerging area of research during the last 15 years. In our approach to this field, we found that $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\text{phosphine})\text{M}(\text{II})$ fragments (M=Ru, Fe) containing *p*-substituted benzonitrile chromophores lead to new materials with significant NLO properties. In this communication we report our recent studies on the system $[\text{Fe}(\text{PP})_2(\text{X})(\text{Y-C}_6\text{H}_4\text{-R}(\text{R}'))]^+$



PP = DMPE, DPPE, DPPEN, ODPPB
 Y = C≡C-(CH=CH)_n, N≡C-(CH=CH)_n,
 n = 0,1
 X = H, Cl
 R = NO₂, R' = H, NO₂

where the systematic variation of acetylide/nitrile ligand and phosphine coligands may give some contribution for the understanding of structure/property relationships for NLO responses. Electrochemical and structural data determined by single X-ray diffraction for compounds

$[\text{Fe}(\text{DMPE})(\text{Cl})(o,p\text{-NCC}_6\text{H}_3(\text{NO}_2)_2)][\text{PF}_6]$ and $[\text{Fe}(\text{DPPEN})(\text{Cl})(p\text{-NCC}_6\text{H}_4\text{-NO}_2)] [\text{PF}_6]$ are discussed on the basis of the involvement of the iron(II) fragment into the conjugation system of the chromophore due to π -backdonation.

SYNTHESIS OF BENZONITRILES DERIVATIVES COMPLEXES OF RUTHENIUM(II). CRYSTAL STRUCTURE OF *trans*- $[\text{RuCl}(p\text{-N}^\circ\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)(\text{DPPE})_2][\text{PF}_6]$

Fernanda Freitas,^a Manuel Vicente,^a J.L. Ferreira da Silva^b, M. Helena Garcia,^b M. Paula Robalo,^{b,c} João Rodrigues,^{a,b}

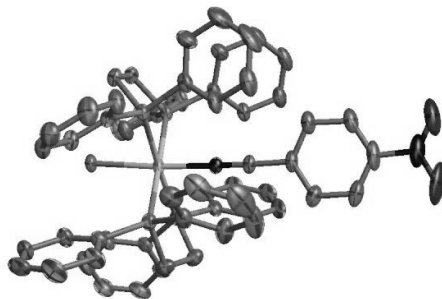
^aNúcleo de Investigação em Química Alimentar e Ambiental, Universidade da Madeira, Funchal, Portugal

^bCentro de Química Estrutural, I. S. T., Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Química, Universidade de Évora, Évora, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts da XXth International Conference on Organometallic Chemistry, Corfu, Grécia, Julho 2002.*

Despite the numerous *trans*-halidealkynylruthenium complexes prepared, usually starting from *cis*- $[\text{RuCl}_2(\text{P-P})_2]$ (P-P = dppe, dppm), only a few halidenitrileruthenium complexes have been reported, nevertheless with a *cis*-geometry around the metal centre¹. We found previously² that the *p*-benzonitriles derivatives of the general formula *p*- $\text{N}\equiv\text{CR}$ (*e. g.* $\text{R}=\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2$, $\text{C}_6\text{H}_4\text{N}(\text{Me})_2$) can be used in the preparation of compounds with very promising NLO properties. In this communication we will present, beyond the preparation and characterization by ¹H, ¹³C, ³¹P NMR, FTIR, UV-vis and EA, of *trans* and *cis*- $[\text{RuCl}(p\text{-N}\equiv\text{CR})(\text{DPPE})_2][\text{PF}_6]$ and the *trans*- $[\text{Ru}(p\text{-N}\equiv\text{CR})_2(\text{DPPE})_2][\text{PF}_6]_2$, the first X-ray crystal structure of a *trans*-halidenitrileruthenium complex the *trans*- $[\text{RuCl}(p\text{-N}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)(\text{DPPE})_2][\text{PF}_6]$. The bond distances within the nitrile ligand are discussed in order to evaluate if the nature of ruthenium-nitrile bonding is in agreement with the spectroscopic data.



A FTIR SPECTROSCOPIC BASED METHOD FOR MEASURING ENZYMATIC ACTIVITY OF A RECOMBINANT AMIDASE

Rita Pacheco,^{a,b} Maria Luísa Serralheiro,^b Amin Karmali,^a Parvez Haris^c

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bCentro de Estudos Bioquímicos e Fisiológicos, FCUL, Lisboa, Portugal

^cDeMontfort University, Department of Biological Sciences, The Gateway, Leicester, United Kingdom

Publicado em: *Livro de Resumos da First International Conference on Biomedical Spectroscopy, Cardiff, Wales, Julho 2002.*

The aliphatic amidase (acylamide amidohydrolase, EC 3.5.1.4.) from *Pseudomonas aeruginosa* which catalyses the hydrolysis of simple aliphatic amides like acetamide and propionamide was discovered by Kelly and Clarke. It as also been shown that the enzyme hydrolyses short-chain aliphatic esters although the rates of these reactions are much slower than the amide hydrolysis. In addition to these hydrolase reactions the enzyme can catalyse a transferase reaction of the acyl moiety of short chain amides, acids and esters to hydroxilamide. The various reactions catalysed by this enzyme have been summarized elsewhere. The investigation of a enzyme kinetics requires the monitoring of the substrates or the reaction products. If this substrates or products have an absorbance or if they can be made visible by an indicator, spectroscopic techniques offer a continuous real-time assay of the enzyme activity. But although the transferase activity forms the basis of a convenient assay of enzyme activity, the assay for the hydrolase activity has long been quite controversial and time consuming. All the hydrolytic activity assays of amidase were measured by discontinuous methods that involved the

stopping of the reaction and a posterior quantification of the substrate or products at a certain time of the reaction by several methods some colorimetric others using techniques such as HPLC, mass spectrometry or gas chromatography. In 1979, Gregoriou and Brown introduced a new continuous method for assaying the enzyme hydrolytic activity but it is a linked assay system in the presence of other enzyme glutamate dehydrogenase and NAD. Besides the fact that it is an expensive method this is clearly a complex procedure that relies upon inclusion of another enzyme and substrates, which may interfere with the amidase activity and complicate the interpretation of the data.

Here we report a simple and rapid spectroscopic based method, which avoids such complication. A Fourier Transform Infrared Spectroscopy method has been developed for assaying the *Pseudomonas aeruginosa* native amidase, overproduced in an *Escherichia coli* strain, catalysed hydrolysis of acetamide in deuterium oxide. The intensity of the acetamide amide I band maximum at 1635 cm^{-1} was measured as a function of time to determine the kinetics of its hydrolysis by the amidase. A value of $0.05\text{ mM}\cdot\text{cm}^{-1}$ was obtained for the extinction coefficient ϵ of acetamide at this frequency. The rate of the hydrolysis was found to be linear with the concentration of the enzyme up to $90\text{ }\mu\text{M}$ of enzyme. The Michaelis-Menten kinetics parameters $V_{\text{máx}}$ and K_{m} were determined as 30.7 UI mg^{-1} and 4 mM , respectively. These results were similar with those obtained using an HPLC analysis of the same amidase hydrolytic reaction in water and buffer suggesting that the FT-IR can be used for the kinetic studies of amidase with the advantage of performing a real time measurement of the enzymatic activity.

ESTUDO ELECTROQUÍMICO DE COMPLEXOS DE ALCINILO DE Fe(II)

Ana I.F. Venâncio,^a Luísa M.D.R.S. Martins,^{a,b} João J.R. Fraústo da Silva^a e Armando J.L. Pombeiro^a

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts do XV Congresso da Sociedade Ibero-Americana de Electroquímica, Évora, Setembro 2002.*

Os alcoóis propargílicos terciários ($\text{HC}\equiv\text{CC}(\text{OH})\text{R}_1\text{R}_2$) são espécies bastante versáteis e, por reacção com um centro metálico, podem converter-se em ligandos do tipo vinilideno, alenilideno e alcinilo.

Neste trabalho procura efectuar-se um estudo comparativo das propriedades doadoras/aceitadoras electrónicas daqueles ligandos através da investigação do comportamento redox dos respectivos complexos de Fe(II).

Assim, o comportamento electroquímico dos complexos de alcinilo $\text{trans-}[\text{FeBr}\{-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}(=\text{CH}_2)\text{Ph}\}(\text{depe})_2]$, $\text{trans-}[\text{FeBr}\{-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}(=\text{CHCH}_3)(\text{CH}_2\text{CH}_3)\}(\text{depe})_2]$ e $\text{trans-}[\text{FeBr}\{-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}(\text{H})\text{Ph}_2\}(\text{depe})_2]$, obtidos por reacção dos complexos de alenilideno $\text{trans-}[\text{FeBr}(=\text{C}=\text{C}=\text{CR}_1\text{R}_2)(\text{depe})_2][\text{BPh}_4]$ ($\text{R}_1 = \text{Me}$, $\text{R}_2 = \text{Ph}$; $\text{R}_1 = \text{R}_2 = \text{Et}$ e, Ph) [1] com o nucleófilo adequado, foi investigado por voltametria cíclica, numa solução de $[\text{NBu}_4][\text{BF}_4]$ (0,2 M) em CH_2Cl_2 , utilizando um eléctrodo de trabalho de disco de Pt, observando-se duas ondas anódicas, sendo a primeira reversível (atribuída à oxidação $\text{Fe(II)}\rightarrow\text{Fe(III)}$) entre 0,07 V-0,16 V vs. S.C.E. e a segunda irreversível entre 1,14 e 1,19V vs. S.C.E..

A partir destes estudos foram estimados os valores dos parâmetros de ligando P_L e E_L , os quais permitem explicar as propriedades doadora/aceitadora electrónica dos ligandos alcinilos. Estas propriedades serão comparadas com as dos ligandos de alenilideno dos respectivos complexos e com espécies relacionáveis, tais como alcinos.

SOL-GEL COATINGS USED AS PRE-TREATMENT FOR ALUMINIUM ALLOYS

A. M. Cabral,^{a,b} R. Duarte,^b I. M. Miranda Salvado,^c M. G. S. Ferreira^{b,c}

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bICEMS/Departamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Cerâmica e do Vidro, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do “Fall Meeting of the European Materials Society Symposium”, Warsaw, Polónia, Setembro 2002.*

The sol-gel process is a very useful way to deposit different coatings on different substrates at room temperature in a simple and reproducible

manner and is a unique method for the preparation of organic-inorganic hybrid coatings.

This type of coatings can be used as corrosion inhibiting promoter for aluminium alloys and stainless steel, its quality depending on the experimental conditions used to prepare the hybrid sols. The presence of intermetallic precipitates, e.g. Al_2Cu , Al_2CuMg , $\text{Al}_{20}\text{Cu}_2(\text{MnFe})_3$, in AA2024-T3 alloys used in the aeronautical industry, makes this type of material prone to localised corrosion. Therefore, their use calls for the need to apply protection, which is very often conferred by paints. However in order to have a good adherence of the paint to the substrate, pre-treatments are necessary, which traditionally are based in Cr VI containing chemicals. Since these products are highly pollutant and carcinogenic, urges their replacement.

In this study silica-based hybrid coatings have been produced by the sol-gel using the dip-coating process. Samples with composition $10\text{ZrO}_2.90\text{SiO}_2$ mol% were prepared from polydimethylsiloxane (PDMS), silanol terminated, with molecular weight equal to 4200. The inorganic precursors were tetraethylorthosilicate (TEOS) and zirconium propoxide. Solutions of TEOS and PDMS in isopropanol (volume ratio 1:1) were first prepared. The solutions were then thoroughly mixed by means of magnetic stirring for 30 minutes at room temperature. After a solution of zirconium propoxide, dissolved in ethylacetoacetate (volume ratio of 1:1) was added. The final solution was used for the dip-coating procedure of aluminium substrates.

Accordingly to the results obtained by Electrochemical Impedance Spectroscopy the coating confers poor protection to the AA2024 alloy, since after 1 day of immersion in 3% NaCl solution pitting corrosion can already be detected on the alloy. Different situation is obtained when a paint layer (polyurethane enamel) is applied on the top of the gel coating. In this case the system behaves very well after long immersion time, showing values of impedance at low frequencies in the order of 10^8 ohm.cm². Thus it seems that the siloxane is effective in promoting the adhesion of the paint coating to the substrate, working as a good coupling agent.

Further experiments are taking place where the porosity, in order to obtain nanostructures, is controlled by changing the ratio alcohol/water and pH. The inclusion of nanocrystals is also envisaged.

SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE EXTRACTION OF ESSENTIAL OIL FROM *Satureja fruticosa* BÉGUINOT

A. P. Pereira,^a J. Burillo,^b J.S. Urieta,^b A.C. Figueiredo,^a J.G. Barroso,^c
R.L.Mendes,^a J.A.P. Coelho,^{a,d} A.M.F.Palavra^a

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química-Física, Servicio de Investigación Agroalimentar, Zaragoza, Spain.

^cCentro de Biotecnologia Vegetal, Dep. de Biologia, FCUL, Lisboa, Portugal

^dDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da 33rd International Symposium on Essential Oils, Lisboa, Portugal, Setembro 2002.*

Aromatic plants produce essential oils, which have important biological functions in plant metabolism. The quality of these oils is also very important in human consumption. The main health applications of *Satureja fruticosa* Béguinot are due to its digestive and gastric properties. Supercritical fluid extraction (SFE) is a separation process, based on the solvent power of supercritical fluids, which can be controlled by changing the pressure and temperature (Palavra *et al.*, 1993, 1995). With this technique it is possible to obtain solvent-free extracts and avoid the degradation of thermally labile components existing in the oils. Therefore, the natural odour and flavour of the plant are maintained, thus making SFE a very promising process for the separation of essential oils from herbaceous matrices (Palavra *et al.*, 1997).

Flowers and leaves of *Satureja fruticosa* Béguinot, cultivated at Servicio de Investigación Agroalimentario, Zaragoza, Spain, were used as matrices in supercritical CO₂ extraction followed by a two stage fractional separation. The process was carried out in a flow apparatus, provided with an extraction vessel (1 L) and two separators (0.27 L, each) at temperatures of 40 and 50 °C and pressures of 90 and 100 bar.

The isolated essential oils were analysed by GC-MS and GC. The oxygen-containing monoterpenes, pulegone (46-56 %), piperitenone (10-13 %), piperitenone oxide (9-14 %) and isomenthone (7-9 %) were the major oil constituents. The effect of the plant particle size, extraction pressure and solvent flow rate on the extraction yield and quality of the obtained oil is discussed.

EXTRACTION OF *SATUREJA MONTANA* L. ESSENTIAL OIL WITH SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE

A. P. Pereira,^a J. Burillo,^b J.S. Urieta,^b A.C. Figueiredo,^a J.G. Barroso,^c
R.L.Mendes,^a J.A.P. Coelho,^{a,d} A.M.F.Palavra^a

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química-Física, Servicio de Investigación Agroalimentar, Zaragoza, Spain.

^cCentro de Biotecnologia Vegetal, Dep. de Biología, FCUL, Lisboa, Portugal

^dDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da 33rd International Symposium on Essential Oils, Lisboa, Portugal, Setembro 2002.*

Aromatic plants are important raw materials for the perfumery, pharmaceutical and food industries. Essential oils from these plants are traditionally obtained by hydrodistillation and solvent extraction, although these techniques have several disadvantages, such as the heat instability of essential oils and the difficulty to remove the solvent from the extract. With supercritical fluid extraction (SFE) it is possible to obtain solvent-free extracts and to avoid the degradation of thermally labile components. Therefore, the natural odour and flavour of the initial material are maintained. *Satureja montana* L. is an aromatic plant that grows in arid, sunny and rocky habitats. The corresponding essential oil, obtained by hydrodistillation, can reach about 1.8 % (w/w). The principal use of this plant is the treatment of stomach ailments due to its carminative and desiccative properties.

Flowers and leaves of *Satureja montana* L., grown at Servicio de Investigación Agroalimentario, Zaragoza, Spain, were used as matrices for supercritical CO₂ extractions, followed by two stage fractional separations. The oil was obtained with a flow apparatus, consisting of an extraction vessel (1L) and two separators (0.27L), in the pressure ranges of 90 to 100 bar and temperature of 40 °C, at the selected separation conditions, and analysed by GC and GC-MS. The essential oil was dominated by the monoterpene fraction, carvacrol (56-72%), being its main component. The amount of the sesquiterpene components was always lower than 2%.

The most convenient conditions of extraction and separation, to obtain the oil from this plant, are discussed.

PREPARATION OF DINUCLEAR TRANSITION RUTHENIUM COMPLEXES USING THE 4,4'-DITHIOPYRIDINE (DTDP) AS A BRIDGE

Manuel Vicente,^a J.C. Mesquita,^a M. Paula Robalo,^{b,c} João Rodrigues,^a J.L. Ferreira da Silva,^b

^aNúcleo de Investigação em Química Alimentar e Ambiental, Universidade da Madeira, Funchal, Portugal

^bCentro de Química Estrutural, IST., Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Química, Universidade de Évora, Évora, Portugal

Publicado em: *Livro de Abstracts da ESF Conference on Supramolecular Chemistry, EuroConference on Molecular Rods, Wires and Switches, San Feliu de Guixols, Espanha, Setembro 2002.*

The experimental and theoretical studies indicate that the conduction properties in a molecular wire are strongly influenced by the nature of the bridge (e.g. shape, structure, bonding mode), and also by the nature of the complexes connected to it. Experimental studies with compounds possessing different bridges are needed in order to delineate more precisely the role played by the metals on the properties of the bridge in such a given molecule. Also the construction of bi- and polymetallic systems containing new types of pi-conjugated and rigid unidimensional bridges linked to two reversibly reducible metal moieties, have regained interest recently since they are prototypes of molecules able to undergo fast electron transfer, a basic requirement in molecular electronic devices. The present work show the most recent experimental studies on the preparation of dinuclear transition metal complexes using the 4,4'-dithiodipyridine (dtdp) as a spacer, a bridging ligand which allows a strong electronic coupling between metals comparable to pyrazine. The dinuclear compounds of the type $[\text{Ru}(\text{PP})_2(\text{Cl})(\text{dtdp})\text{Ru}(\text{PP})_2(\text{Cl})][\text{PF}_6]_4$ (PP=dppe, dppm) were characterized by ^1H , ^{13}C , ^{31}P NMR, FTIR, UV-Vis, VC and by elemental analysis. Spectroscopic data are discussed in view of their potential use as building blocks for molecular wires.

QUANTIFICAÇÃO DO TEOR EM CHUMBO POR SQWASV NAS FOLHAS DOS CHOUPOS (*POPULUS*) DA CIDADE DE LISBOA

Nelson A. F. Silva,^{a,b} M. Irene S. Lopes,^b Ruben A. E. Leitão,^a Manuel J. Matos^a

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal.

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal E-mail: nsilva@deq.isel.pt

Publicado em: *Livro de Resumos do Simpósio Ibero-americano de Electroquímica- SIBAE 2002, Évora, Portugal, Setembro de 2002.*

Com o presente trabalho pretende fazer-se uma caracterização dos teores de chumbo ainda presentes nas folhas dos choupos (*Populus*) resultante dos largos anos de utilização de gasolina com chumbo. O objectivo principal é verificar se ocorre uma diminuição do teor deste metal nas amostras em consequência do desaparecimento da gasolina com chumbo do mercado, bem como relacionar a quantidade deste elemento nos diversos locais de amostragem com a respectiva intensidade de tráfego automóvel.

Recolheram-se amostras de folhas em vários locais da cidade nos anos de 1998 a 2002 com um plano de amostragem idêntico para todos os anos de recolha. As amostras foram sujeitas a um tratamento de secagem e posterior digestão ácida num forno de microondas, método de grande rapidez e já anteriormente validado face à digestão clássica.

A determinação do teor em chumbo, presente em quantidades vestigiais, foi feita por Voltametria de Redissolução Anódica de Onda Quadrada (SQWASV) utilizando o método da adição padrão. O procedimento seguido incluiu a deposição conjunta de um filme de mercúrio e do metal em estudo na superfície de um eléctrodo de carbono vítreo, utilizando-se ainda o eléctrodo de Ag/AgCl como referência e um eléctrodo de platina como auxiliar.

Uma vez que além do chumbo, foi também detectada a presença de cobre e cádmio nas amostras em estudo, testou-se a aplicabilidade deste método na determinação conjunta destes metais.

A validação do método foi feita comparando os resultados obtidos por SQWASV com os obtidos por Espectrofotometria de Absorção Atómica com Câmara de Grafite.

SEGURANÇA INTEGRADA EM LABORATÓRIOS DE ANÁLISE QUÍMICA

Vítor J. M. Borges, Manuel J. Matos

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal E-mail: vborges@deq.isel.ipl.pt

Publicado em: *Livro de Resumos do VII Simpósio Nacional do ISMAI - Segurança, Higiene e Saúde no Trabalho, Maia, Portugal, Outubro de 2002.*

As condições de trabalho, nomeadamente em termos de segurança e higiene, são factores muito importantes na vida dos trabalhadores e na produtividade e competitividade das empresas, sendo um direito consagrado na Constituição da República. Esta lógica pode também ser aplicada à vida académica, e às condições de trabalho de alunos, docentes e técnicos, com o objectivo de melhorar a qualidade do binómio ensino/aprendizagem e eficiência das instituições. Na actualidade, considera-se que a promoção da saúde e segurança no trabalho se deve traduzir numa intervenção global e integrada, envolvendo todos os intervenientes.

O trabalho em Laboratório é, como se sabe, uma actividade de elevado risco, estando todos os que nele trabalham sujeitos a diversos riscos, como por exemplo, contacto com agentes químicos, explosão, incêndio e riscos eléctricos.

No sentido de aplicar no nosso laboratório uma política de prevenção de acidentes, definimos algumas medidas a implementar. Estas passaram numa primeira fase por medidas de protecção colectiva, como são os casos dos sistemas de armazenagem de gases com sistema de detecção e alarme de fugas, aplicação de chuveiros e lava-olhos, aquisição de extintores em número suficiente e respectivo programa de manutenção, aquisição de mantas anti-fogo e caixas de primeiros socorros. A etapa seguinte, que se encontra em aplicação, tem por objectivo envolver todos os intervenientes numa lógica de consciencialização, informação e atitude responsável e de aplicação de medidas de protecção individual. Neste sentido optámos pela realização de uma aula específica dedicada aos aspectos ligados à segurança no laboratório, com carácter obrigatório e definimos algumas regras a aplicar a todos os utilizadores deste laboratório.

HEAVY METALS (Pb, Cu, Cd) MONITORIZATION IN THE CITY OF LISBON USING THE WHITE POPLAR (*POPULUS*) AS BIOINDICATOR

Manuel J. Matos,^a Nelson A. Silva,^{a,b} Tiago M. Arruda,^a Hugo F. Silva,^a Vitor M. Borges,^a Irene S. Lopes,^{a,b} Ruben E. Leitão^{a,b}

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal E-mail: mmatos@deq.isel.pt

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos da 3rd European Meeting on Environmental Chemistry - EMEC3, Genebra, Suíça, Dezembro de 2002.*

This work presents a monitorization of heavy metals (Pb, Cu, Cd) concentration in urban areas as a result of traffic emissions, using as bioindicator a common species available in the whole city of Lisbon. The chosen bioindicator were white poplar (*Populus*) a deciduous species which guaranties new leaves each year.

White poplar leave samples were gathered in eight areas ranging from high to low traffic intensity, high to low density of population and open to closed topology using standardised gathering methods.

For the digestions of the leaves classical humid and dry digestion methods were initially used. These procedures are time and reagent consuming so a microwave digestion method was optimised to deal with this type of sample. The latter method, once optimised showed to be fast, clean and efficient.

The analytical methods used for the heavy metals determination were atomic absorption spectrometry with graphite chamber and anodic stripping voltammetry.

The contends in heavy metals determined in eight areas of Lisbon city are according with the traffic intensity, in areas of intense traffic were obtained the higher values of heavy metals. The results obtained by the two methods agree within the experimental error.

EXTRACTION AND PURIFICATION OF PROTEINS BY CALIXARENE CARBOXYLIC ACID DERIVATIVES IN ORGANIC MEDIA

Magda C. Semedo, Patrícia D. Barata, José V. Prata e Amin Karmali

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos do XIII Congresso Nacional de Bioquímica, Lisboa, Portugal, Dezembro 2002.*

Calix[n]arenes are interesting compounds because they can be used as recognition or modification tools for biological macromolecules such as proteins. In the present work, several calixarene carboxylic acid derivatives ([n]= 4, 6 and 8) were used for extraction of model proteins in chloroform such as myoglobin, hemoglobin, cytochrome c and

horseradish peroxidase. All calixarenes were able to extract these proteins into organic phase with a recovery of about 90%. The molecular mechanism of recognition involves the interaction of protonated amino groups at protein surface with carboxylic acid groups in the calixarene molecule since protein extraction did not occur when the corresponding calixarene ester derivatives were used. Furthermore, horseradish peroxidase exhibited enzyme activity in organic solvents catalysing the oxidation of *o*-dianisidine in the presence of hydrogen peroxide. The use of calixarenes was also investigated for extraction and purification of laccase from cell-free extract of *Fusarium sp.*. Calixarenes were useful in extraction and purification of these enzymes with a good recovery of enzyme activity and purification factor. On the other hand, the proteins could be recovered with a high yield in a fresh aqueous solution by altering the pH and addition of 10% (v/v) of isopropyl alcohol. The data obtained strongly supports that calixarenes can be used for extraction and purification of proteins as well as a modification tool of the enzyme activity of biocatalysts.

PRÉ-TRATAMENTOS COM SILANOS PARA LIGAS DE ALUMÍNIO

R. Duarte,^a A. Cabral,^b F. Montemor,^a M.G.S.Ferreira^{a,c}

^aCEMS, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Engenharia Cerâmica e do Vidro, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal

Publicado em: *Livro de Resumos das 3^{as} Jornadas de Revestimentos Funcionais, Guimarães, Portugal, Dezembro de 2002.*

Nos últimos anos tem havido um esforço consertado na pesquisa de métodos alternativos aos tratamentos de conversão à base de crómio, actualmente usados como pré-tratamentos para as ligas de alumínio. De facto estes apresentam problemas ambientais e de toxicidade associados ao uso dos iões Cr(VI), razão pela qual se torna urgente a sua abolição dos processos industriais.

Diferentes alternativas têm sido estudadas e reportadas na literatura. Uma dessas alternativas baseia-se na utilização de silanos, que parecem apresentar boas propriedades de aderência.

Neste trabalho foram aplicados na liga de alumínio AA 2024-T3, filmes de três silanos sem grupos funcionais orgânicos (BTSE, BTESPT e

MPS). Foi avaliado o seu desempenho anticorrosivo, a resistência à fadiga da liga tratada e feita a caracterização analítica e estrutural dos filmes. Foram, também, ensaiados com sucesso tratamentos à escala piloto, numa empresa industrial do sector aeronáutico.

Os resultados mostram que este tipo de materiais se podem considerar muito promissores em termos de desempenho como pré-tratamentos, não afectando negativamente a resistência à fadiga da liga.

Keywords: Conversão crómica, Silanos, Ligas de alumínio, AA 2024-T3

MATERIAIS MICROPOROSOS: ESTUDO COMPARATIVO DA ACIDEZ DE ARGILAS COM PILARES E DE UM ZEÓLITO DO TIPO Y

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

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio de 2002.*

Caracterização da acidez de um conjunto de argilas com pilares de alumínio e de zircónio, usando como material de comparação um zeólito do tipo Y.

Foram utilizadas como técnicas de caracterização de acidez a adsorção/desorção de piridina seguida por espectroscopia de infravermelho e a transformação catalítica do buteno-1.

CARACTERIZAÇÃO DA REACÇÃO $M + XNH_3 \rightleftharpoons [M(NH_3)_x]^{+} + XE^{-}$ (M=Cu, Ni, Ag) ATRAVÉS DE CURVAS POTENCIOSTÁTICAS

A. Martins, M. Matos, N. Nunes, R. Elvas Leitão

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Neste trabalho fez-se o estudo de interfases metal/solução, através do traçado de curvas potenciostáticas. Foram usados eléctrodos de cobre, níquel e prata e soluções de amónia de concentrações diferentes como electrólitos. O objectivo deste trabalho foi a determinação dos parâmetros cinéticos que caracterizam os eléctrodos ensaiados bem como estudar a influência da concentração da solução de amónia nesses parâmetros.

COMPARAÇÃO DA PERFORMANCE ENERGÉTICA DE DIFERENTES PRODUTORES ELECTROQUÍMICOS DE ENERGIA

José A. Coelho, Manuel J. Matos, Ruben A. Elvas Leitão, Nelson Nunes

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Efectuou-se o estudo e caracterização energética de 6 diferentes células electroquímicas produtoras de energia (PEE) procedendo-se á sua descarga a corrente constante entre os 50 e 1000 mA. Utilizou-se um sistema de aquisição automático para registo dos valores do potencial em função do tempo. Todos estes PEE eram células primárias, sendo duas delas pilhas de Leclanché e as restantes alcalinas. Para cada tipo de PEE foram determinadas as grandezas energéticas: capacidade eléctrica, densidade de energia e eficiência energética. Verificou-se que as pilhas alcalinas apresentavam em todos os parâmetros um desempenho superior quando comparadas com as Leclanché. Por outro lado as diferentes marcas foram comparadas atendendo aos parâmetros energéticos obtidos.

TECNOLOGIA QUÍMICA – ELIXIR DA VIDA

B. Santos Baptista

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

Pelo **Princípio da Conservação da Energia** aprendemos: nada se cria, nada se perde, tudo se transforma.

Através de um *zoom*, efectuemos uma mudança rápida de escala, passando do Universo para o nosso planeta Terra, então fica mais clara a omnipresença da Indústria Química no nosso quotidiano.

A Indústria Química, obedecendo ela própria ao mesmo princípio tem-se renovado, direccionado em vários quadrantes, fruto dos objectivos do Homem, sua investigação, suas acções.

O *Homo sapiens*, teófilo e curioso, leva a descobertas que transformam o Mundo e os Conceitos reinantes.

A Tecnologia Química, incorporada na Indústria Química, ela própria fez o seu percurso ao longo de várias eras.

Assim, assente no *fogo* desenvolveram-se as tecnologias de:

Primeiro - cozedura dos alimentos. Segundo – procura do ouro e do elixir da vida.

Terceiro – o minério transforma-se em aço, betão... – Era Industrial.

A Era Pós-Industrial, já está aí, trazendo consigo os problemas não resolvidos: segurança, saúde, pão e água para toda a população. A bioquímica como corolário da análise do corpo humano, rumo à longevidade, melhor saúde, comportamento em condições extra-terrestres. O peso das tecnologias ambientais como consequência da poluição feita nos três meios, terra, água e ar e as consequências provocadas nos reinos mineral, vegetal e animal.

A solução estará na aposta abnegada na Tecnologia Química, tenha ela servidores com a dimensão superior ao dos desafios colocados.

O SISTEMA DE AVALIAÇÃO DE CONHECIMENTOS DO ISEL, OPINIÃO DOS ALUNOS

Manuel J. Matos,^{a,b} Helena M. N. T. Avelino,^a Manuela E. Gonçalves,^{a,b} Constantino S. Soares^a

^aConselho Pedagógico (biénio 2000/2001), ISEL, Lisboa, Portugal

^bComissão de Auto-Avaliação, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio 2002.*

O Sistema de Avaliação de Conhecimentos em vigor no ISEL tem já largos anos. De forma a adequá-lo à realidade que é hoje o ISEL é necessário proceder-se a algumas alterações. O Conselho Pedagógico deliberou assim efectuar um inquérito de opinião aos alunos com dois objectivos primordiais: recolher a sua opinião sobre o Sistema de Avaliação de Conhecimentos em vigor e procurar indicadores para possíveis alterações deste. O inquérito, anónimo, foi realizado no acto da inscrição do ano lectivo 2000/2001 e obteve uma taxa de respostas bastante elevado, cerca de 80%. Da análise dos resultados é de salientar que os alunos pretendem ver implementado um novo Sistema de

Avaliação. O Conselho Pedagógico do biénio 2000/2001, depois de analisar e reflectir sobre os resultados obtidos, elaborou uma proposta para um novo Sistema de Avaliação de Conhecimentos que se encontra para aprovação no Conselho Científico.

VERSÃO ADAPTATIVA PARA UM ALGORITMO DE CONTROLO MPC: APLICAÇÃO A UM REACTOR BATCH

J. M. Igreja, J. E. Cruces

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Actas da Conferência Científica e Tecnológica em Engenharia, Lisboa, Portugal, Maio de 2002.*

Neste trabalho apresenta-se e estuda-se o desempenho de um algoritmo de controlo adaptativo. O algoritmo baseia-se num esquema do controlo preditivo do tipo MPC (Model Predictive Control) capaz de lidar com restrições na entrada e saída do processo. O algoritmo tenta resolver, em cada iteração, um problema QP (Quadratic Programming) equivalente ao problema de controlo ao mesmo tempo que aplica um RLS (Recursive Least Square) para estimar os parâmetros do modelo do processo. Estuda-se ainda a viabilidade da solução QP e a estabilidade do sistema em malha fechada. Os resultados são ilustrados com um exemplo de uma função de transferência de fase não mínima e com a aplicação a um modelo não linear de um reactor Batch.

AN I/O MIXED CONSTRAINED STABILIZING MPC APPLIED TO NONLINEAR PROCESSES

J. M. Igreja, J. E. Cruces

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Proceedings of the 10th IEEE Mediterranean Conference on Control and Automation, Lisboa, Portugal, Julho de 2002.*

A constrained stabilizing receding horizon predictive controller is developed in GPC framework. The open loop QP minimization problem

with mixed constraints over the prediction horizon is formulated. The optimization subroutine uses Lemke's method to attempt to minimize the objective quadratic function subject to a set of linear restrictions for the non-negative decision variables. Closed loop stability conditions are discussed for the unconstrained and constrained cases. Feasibility management is also addressed. Two illustrative simulation applications of nonlinear chemical reactors models are presented.

MIXED CONSTRAINED STABILIZING PREDICTIVE CONTROL: AN EXTENSION TO MULTIVARIABLE PROCESSES

J. M. Igreja

Departamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Proceedings of the 5th Portuguese Conference on Automatic Control, Controlo 2002, Associação Portuguesa de Controlo Automático, IFAC National Member Organization, Aveiro, Portugal, Setembro de 2002.*

A mixed constrained stabilizing receding predictive controller is developed as a SIORHC extension to multivariable processes. The terminal equality constrained control law is derived and the open-loop QP equivalent minimization problem over the prediction horizon with input/output mixed constraints is formulated. The optimization subroutine uses Lemke's method to attempt to minimize the objective quadratic function subject to a set of linear restrictions for the non-negative decision variables. Closed-loop stability conditions are discussed for the both cases. Connections to GPC and to Fixed-Final-State Optimal Control are established. Feasibility management is also addressed. An illustrative example and a process application are presented.

ENVIRONMENTALLY FRIENDLY PRE-TREATMENTS FOR ALUMINIUM ALLOYS

R. Duarte,^a A. Cabral,^b M. F. Montemor,^a J. C. S. Fernandes,^a M.G.S.Ferreira^{a,c}

^aDepartamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Engenharia Cerâmica e do Vidro, Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal

Publicado em: *Proceedings do 15th INTERNATIONAL CORROSION CONGRESS – Frontiers in Corrosion Science and Technology, Granada, Spain, September 2002.*

Traditionally Cr(VI) compounds are widely used in conversion coatings, deoxidisers, sealants and paints. However they present health and environmental problems that make their replacement mandatory. Different alternative approaches have been studied. In this work, apart discussing the chromate conversion process, two alternative methods that could be used for pre-treatments of aluminium that are subsequently painted are shown. One of these methods is a wet process that uses silanes and the other one is a dry process where a SiO₂ film is deposited by plasma polymerisation. In both cases the films obtained improve both corrosion resistance of the substrate and adhesion of the paint.

Keywords: Chromate conversion, Silanes, Plasma polymerisation, Aluminium alloys.

METAL-HYDRIDE BOND ACTIVATION AND METAL-METAL INTERACTION IN DINUCLEAR IRON COMPLEXES WITH LINKING DINITRILES: A SYNTHETIC, ELECTROCHEMICAL AND THEORETICAL STUDY

A.I.F. Venâncio,^a M.L. Kuznetsov,^a M.F.C. Guedes da Silva,^{a,b} L.M.D.R.S. Martins,^{a,c} J.J.R. Fraústo da Silva^a and A.J.L. Pombeiro^a

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bUniversidade Lusófona de Humanidades e Tecnologias, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Inorganic Chemistry*, 2002, **41**, 6456-6468.

The dinuclear iron(II)-hydride complexes $[\{\text{FeH}(\text{dppe})_2\}_2(\mu\text{-LL})][\text{BF}_4]_2$ (LL = NCCH=CHCN **1a**, NCC₆H₄CN **1b**, NCCH₂CH₂CN **1c**; dppe = Ph₂PCH₂CH₂PPh₂) and the corresponding mononuclear ones, *trans*-[FeH(LL)(dppe)₂][BF₄] (**2a**, **2b**, **2c**) were prepared by treatment of *trans*-[FeHCl(dppe)₂], in thf and in the presence of Tl[BF₄], with the appropriate dinitrile (in molar deficiency or excess, respectively). Metal-metal interaction was detected by cyclic voltammetry for **1a** which, upon single-electron reversible oxidation, forms the mixed valent Fe^{II}/Fe^{III} **1a**⁺ complex. The latter either undergoes heterolytic Fe–H bond cleavage (loss of H⁺) or further oxidation, at a higher potential, also followed by hydride-proton evolution, according to ECECE or EECECEC mechanistic processes, respectively, which were established by digital simulation. Anodically-induced Fe–H bond rupture was also observed for the other complexes and the detailed electrochemical behaviour, as well as the metal-metal interaction (for **1a**), were rationalized by *ab initio* calculations for model compounds and oxidized derivatives. These calculations have allowed to obtain the structural parameters (full geometry optimization), the most stable isomeric forms, the ionization potentials, the effective atomic charges and the molecular orbital diagrams, as well as to predict the nature of the other electron-transfer induced chemical steps *i.e.* geometric isomerization and nucleophilic addition, by BF₄⁻, to the unsaturated iron centre resulting from hydride-proton loss. From the values of the oxidation potential of the complexes, the electrochemical P_L and E_L ligand parameters were also estimated for

the dinitrile ligands (LL) and for their mononuclear complexes **2** considered as ligands towards a second binding metal centre.

SYNTHESIS AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF h^5 -MONOCYCLOPENTADIENYLIRON(II) ACETYLIDE COMPLEXES. X-RAY CRYSTAL STRUCTURES OF $[Fe(\eta^5-C_5H_5)(DPPE)(p-C \equiv CC_6H_4NO_2)]$ and $[Fe(\eta^5-C_5H_5)(DPPE)((E)-p-C \equiv CC_6H_4C(H)=C(H)C_6H_4NO_2)]$

M.H. Garcia^{a,b*}, M.P. Robalo^{a,c}, A.R. Dias^a, M.T. Duarte^a, W. Wenseleers^d, G. Aerts^d, E. Goovaerts^d, M.P. Cifuentes^e, S. Hurst^e, M.G. Humphrey^e, M. Samoc^f and B. Luther-Davies^f

^aCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Química, Universidade de Évora, Évora, Portugal

^dPhysics Department, University of Antwerp (UIA), Wilrijk-Antwerpen, Belgium

^eDepartment of Chemistry, Australian National University, Canberra, Australia

^fAustralian Photonics Cooperative Research Centre, Australian National University, Canberra, Australia

Publicado em: *Organometallics*, **2002**, 21, 2107-2218.

A series of new acetylide complexes of the type $[Fe(\eta^5-C_5H_5)(P-P)(p-C \equiv CC_6H_4R)]$ ($P-P = DPPE, (R)-PROPHOS, R = NO_2, C_6H_4NO_2, (Z)-C(H)=C(H)C_6H_4NO_2, (E)-C(H)=C(H)C_6H_4NO_2$)) had been synthesised by halide abstraction from the precursors $[Fe(\eta^5-C_5H_5)(P-P)(I)]$ and fully characterised.

Quadratic hyperpolarizabilities (β) for the complexes have been determined by hyper-Rayleigh scattering at 1064 nm. The influence on the non-linear response of acetylide chain length in proceeding from 4-nitrophenylethynyl to 4-nitrobiphenylethynyl and 4-nitro-(*E*)-stibenylethynyl has been studied, revealing values of the first hyperpolarizabilities amongst the highest reported for organometallic molecular materials. Comparisons on the non-linear efficiencies are drawn with the related well known families of compounds $[Ru(\eta^5-$

$C_5H_5)(PR_3)_2(p-C \equiv C-(aryl)-NO_2)]$ and $[Fe(\eta^5-C_5H_5)(P-P)(p-N \equiv C-(aryl)-NO_2)]^+$. Cubic hyperpolarizabilities (γ) determined by Z-scan at 800 nm are consistent with an increase in γ upon replacing Ru by the more easily oxidizable Fe, and upon chain-lengthening the delocalizable π -bridging unit (proceeding from 4- C_6H_4 to (*E*)-4,4'- $C_6H_4CH=CHC_6H_4$).

X-ray crystallographic structures of complexes $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\text{DPPE})(p\text{-C}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)]$ and $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\text{DPPE})((E)\text{-}p\text{-C}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{C}(\text{H})=\text{C}(\text{H})\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2)]$ were studied in order to investigate the existence of π -back-donation suggested by spectroscopic and electrochemical data. Crystal packing was analysed with the aim of assessing the alignment of the molecules in the lattice and hence suggesting the magnitude of NLO properties at the macroscopic level.

POTENTIALITIES OF DIFFUSE REFLECTANCE LASER-INDUCED TECHNIQUES IN SOLID PHASE: A COMPARATIVE STUDY OF BENZOPHENONE INCLUSION WITHIN *p*-tert-BUTYLCALIXARENES, SILICALITE AND MICROCRYSTALLINE CELLULOSE

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

^aCentro de Química-Física Molecular - Complexo Interdisciplinar, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cCentro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, FIOCRUZ, Rio de Janeiro, Brasil

Publicado em: *Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **2002**, 153, 11-18.

Diffuse reflectance and laser-induced techniques were used to access photochemical and photophysical processes in solid phases, namely calix[n]arenes (n is the number of phenolic units in the ring), organic substances which form inclusion complexes with several neutral organic substances and metal ions. We have used *p*-tert-butylcalix[4], [6] and [8]arenes as solid matrixes and benzophenone (BZP) as probe. A comparative study is presented here, mainly using the results obtained with calix[6]arene as host and with two other electronically inert supports: microcrystalline cellulose and silicalite, a hydrophobic zeolite. In all substrates, room temperature phosphorescence was obtained in air equilibrated samples. The decay times vary greatly and the largest lifetime was obtained for silicalite, where BZP is included into hydrophobic channels. Calix[6]arene and cellulose provide full protection against oxygen quenching while silicalite only protects the guest molecule partially.

Calixarene molecules provide larger hydrophobic cavities than silicalite and also a better selectivity towards the guest size. This selectivity does not exist in the microcrystalline cellulose case.

FT-IR absorption spectra show that distortion from planarity in the BZP molecule is larger in silicalite than in calix[6]arene, while in cellulose the distortion is slight. In spite of this, BZP exhibits the highest phosphorescence emission quantum yield in silicalite.

BZP ketyl radical formation occurs with entrapment in cellulose and also with inclusion in calix[6] and [8]arenes, while in silicalite only triplet-triplet absorption is detected.

A DIFFUSE REFLECTANCE COMPARATIVE STUDY OF BENZIL INCLUSION WITHIN *p*-tert-BUTYLCALIX[*n*]ARENES (n=4, 6 AND 8) AND SILICALITE

L.F. Vieira Ferreira,^a I. Ferreira Machado,^a A.S. Oliveira,^a M.R. Vieira Ferreira,^b J.P. Da Silva,^{a,c} J.C. Moreira^d

^aCentro de Química-Física Molecular - Complexo Interdisciplinar, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cFCT, Universidade do Algarve, Faro, Portugal

^dCentro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, FIOCRUZ, Rio de Janeiro, Brasil

Publicado em: *J. Physical Chemistry B*, **2002**, 106, 12584-12593.

Diffuse reflectance and laser-induced techniques were used to access photochemical and photophysical processes of benzil in solid supports, namely *p*-tert-butylcalix[*n*]arenes with n=4, 6 and 8. A comparative study was performed using these results and those obtained with another electronically inert support, silicalite, a hydrophobic zeolite. In the zeolite ground-state benzil has the two carbonyl groups in a *s*-trans planar conformation while in the calixarenes a distribution of conformers exists, largely dominated by skew conformations where the carbonyl groups are twisted one to the other. In all substrates, room temperature phosphorescence was obtained in air equilibrated samples. The decay times vary greatly and the largest lifetime was obtained for benzil/*p*-tert-butylcalix[6]arene, showing that this host cavity well accommodates benzil, enhancing its room temperature phosphorescence. *p*-tert-Butylcalix[6] and [8]arenes provide larger hydrophobic cavities than silicalite and inclusion complexes are formed with these hosts and benzil as guest, while *p*-tert-butylcalix[4]arene does not include benzil. This probe is deposited outside the calix[4] cavity, in the form of microcrystals. Triplet-triplet absorption of benzil was detected in all cases and is predominant in the silicalite channel inclusion case. Benzil

ketyl radical formation occurs with inclusion in calix[6]arene and calix[8]arene. In the three cases benzoyl radical was detected at long times (in the milisecond time scale).

Product analysis and identification clearly show that the main detected degradation photoproducts in all substrates are benzoyl radical derivatives. Calix[6] and [8]arenes are able to supply hydrogen atoms that allow also another reaction, the reduction to benzoin through benzil ketyl radicals formation.

DIFFUSE REFLECTANCE STUDIES OF *b*-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

^aCentro de Química-Física Molecular - Complexo Interdisciplinar, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^cCentro de Estudos da Saúde do Trabalhador e Ecologia Humana, ENSP, FIOCRUZ, Rio de Janeiro, Brasil

Publicado em: *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2002**, 4, 204-210.

The formation of inclusion complexes of *b*-phenylpropiophenone and benzophenone 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.

Benzophenone $n \rightarrow \pi^*$ absorption band exhibits hypsochromic shifts with the increase of the calix ring aperture, providing evidence for an increase in cavity polarity.

b-Phenylpropiophenone exhibits strong room temperature phosphorescence in contrast with its solution behaviour, and this is a clear evidence for the inclusion of this probe within the calix molecules. Calix[4]arene and calix[8]arene provide a more rigid environment to *b*-phenylpropiophenone whereas calix[6]arene appears to be more flexible. Transient absorption spectra of inclusion complexes with benzophenone (1:1 mol:mol, excited at 355 nm) show major triplet formation in the calix[4]arene case, while the ketyl radical of benzophenone is formed in the calix[6]arene case and is predominant in the calix[8]arene case. Phenoxy radicals transient absorption become also evident in the two latter cases.

For *b*-phenylpropiophenone (1:1 mol:mol) phenoxy radicals are formed but no evidence was found for triplet or ketyl radical formation of this ketone in the calix[4]arene case. However, strong support for ketyl radical of the aryl alkyl ketone was found for calix[6]arene and calix[8]arene inclusion complexes.

INTRAMOLECULAR ADDITION OF ACYLDIAZENECARBOXYLATES ONTO DOUBLE BONDS IN THE SYNTHESIS OF HETEROCYCLES

José V. Prata,^a Dina-Telma S. Clemente,^b Sundaresan Prabhakar,^b Ana M. Lobo,^b Isabel Mourato^b (in part) and Paula S. Branco^b (in part)

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal E-mail: jyprata@deq.isel.pt

^bDepartamento de Química, FCT-UNL, Monte de Caparica, Portugal E-mail: sp@dq.fct.unl.pt

Publicado em: *J.Chem.Soc., Perkin Trans. 1*, **2002**, 513-528.

Appropriate aryl substituted unsymmetrical azodicarbonyl compounds generated from bis-hydrazides by oxidation, undergo intramolecular cyclisations to furnish a variety of useful heterocycles such as *N*-substituted oxindoles, carbostyrils, benzazepinones, benzazocinones, benzimidazolones, benzoxazinones and pyrazolones in varying degrees of efficiency. Methods are described to remove the *N*-acyl groups from the heteroaromatic compounds. Under mildly acidic conditions where equal opportunities are available for an *ipso* or a normal cyclisation it is the former process that occurs preferentially. Evidence is presented in favour of a C to C migration in the *ipso* product for the formation of a methoxy substituted carbostyryl derivative. One of the spiro substances is shown to participate in dienone-phenol rearrangement to provide the corresponding quinolone-phenol in high yield.

STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF THE TERNARY SOLVENT MIXTURE METHANOL- ACETONITRILE- 1-PROPANOL

Ruben Elvas Leitão,^a Filomena Martins,^b M. Cristina Ventura,^b Néelson Nunes^a

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Química e Bioquímica, FCUL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Journal of Physical Organic Chemistry*, **2002**, 15, 623-630.

Refractive indices and E_T values were measured for the ternary mixture methanol-acetonitrile-1-propanol at 25.0°C for 13 mole fractions, and also for the corresponding binary mixtures, methanol-1-propanol, methanol-acetonitrile and 1-propanol-acetonitrile, at 25.0 and 50.0°C, at 10 different compositions. Solvent exchange equilibrium models were applied to the transition energy of the Dimroth-Reichardt $E_T(30)$ solvatochromic indicator in the binary systems and the Redlich-Kister polynomial was used to correlate excess E_T^N and n_D values for the binary solvent mixtures data. The results allowed the analysis of synergetic behaviours, polarizability effects and preferential solvation trends both in the binary and in the ternary mixtures. Our results point towards the prevalence of specific solute-solvent-solvent interactions mainly due to hydrogen bonding by the hydroxylic components of the ternary mixture.

DENSITY OF FLUIDS AND THEIR BINARY MIXTURES AT HIGH TEMPERATURES

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

^aDepartamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Entropie*, **2002**, 239/240, 173-176.

Accurate isochoric studies on the density of pure fluids and their binary mixtures at high temperatures, involving small molecules like H₂, Ar, CH₄, H₂O and CH₃OH, are presented. The importance of these studies in the design of equipment for energy industries is analysed. Furthermore, the effect of thermal degradation of fluids at high temperatures on the accuracy of the density measurements is also discussed.

SOLUBILITY OF BIXIN AND BIXIN/b-CAROTENE MIXTURES IN SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE

B.P. Nobre,^a E. M. Queiroz,^b F.L.P.Pessoa,^b J.P. Coelho,^{c,d} A. F. Palavra,^d R.L.Mendes^a

^aDepartamento de Energias Renováveis, INETI, Lisboa, Portugal

^bDepartamento de Engenharia Química, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil

^cDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^dCentro de Química Estrutural, IST, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Chemical Engineering Transactions*, **2002**, 2, 391-396.

The solubility of bixin in supercritical CO₂ was measured at temperatures of 40, 50 and 60 °C and pressures up to 350 bar, using a flow apparatus. The solubility of a mixture of β-carotene and bixin, in equal weight proportions, in supercritical CO₂ was also determined with the same flow apparatus at temperatures of 40 and 60 °C and pressures up to 350 bar. Previously to these studies, the impurities interfering in the quantification of the β-carotene and bixin were removed from the solid samples at 40 °C and 200 bar with supercritical CO₂ and CO₂ modified with 5 % (mole) of ethanol, respectively. The solubility results obtained with the solid mixture of carotenoids were compared, for both compounds, with those obtained in the β-carotene- CO₂ and bixin- CO₂ binary systems.

EFFECT OF THE PARTIAL REPLACEMENT OF FE BY Ni AND/OR Mn ON THE ELECTROCATALYTIC ACTIVITY FOR OXYGEN EVOLUTION OF THE CoFe₂O₄ SPINEL OXIDE ELECTRODE

M.Isabel Godinho^a, M.Alice Catarino^a, M.I.da Silva Pereira^b, M.H.Mendonça^b, F.M. Costa^b

^aDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

^bCCMM, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Electrochimica Acta*, **2002**, 47, 4307-4314.

The study of the electrochemical behaviour of mixed spinel oxide electrodes, obtained by the partial replacement of Fe by Ni and/or Mn in the cobalt ferrite CoFe₂O₄ is presented. The electrodes were prepared by brush painting of iron substrates with a suspension of the respective oxide, prepared by solid-state reaction. The influence of the substituent on the electrodes electrocatalytic activity towards the OER is analysed in terms of the kinetic parameters obtained by steady state measurements and the cationic distribution proposed for the oxides. The data show that the introduction of Ni brings about the presence of Co³⁺ tetrahedrally coordinated in addition to the Co³⁺/Co²⁺ couple in octahedral sites, giving

rise to a better electrocatalyst for the OER. In contrast the presence of Mn produces electrodes with lower catalytic activity.

BASIC CS-PT/MCM-41 CATALYSTS: SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND ACTIVITY IN N-HEXANE CONVERSION

J. Blanchard^a, K. Fajerwerg^a, M. Breysse^a, P. Beaunier^a, M. F. Ribeiro^b, J.M. Silva^c, P. Massiani^a

^aLaboratoire de Réactivité de Surface, UMR 7609, CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France

^bDepartamento de Engenharia Química, IST, Lisboa, Portugal

^cDepartamento de Engenharia Química, ISEL, Lisboa, Portugal

Publicado em: *Catalysis Letters*, **2002**, 83, 221-229.

Cs-Pt/MCM-41 catalysts with basic character have been prepared by selective adsorption of $\text{Pt}(\text{NH}_3)_4(\text{OH})_2$ at $\text{pH}=8$ on pure silica MCM-41 followed by incipient-wetness impregnation of CsNO_3 , then oxidation and reduction. The influence of the amount of Cs (0, 2 and 4 wt%) on the size of the reduced Pt particles and on their catalytic behavior in the conversion of *n*-hexane has been investigated. Whatever the Pt content (0.7 or 2 wt% Pt), the addition of Cs results in a higher Pt dispersion, a higher initial activity and a higher selectivity for aromatization. On the more basic Pt-richest MCM-41 sample (4 wt% Cs, 2 wt% Pt) the selectivity to benzene reaches values close to those obtained on Cs-enriched Pt/Cs-BEA zeolite. However, the catalytic stability is lower. The catalytic trends are discussed in view of the physicochemical properties of the solids determined by chemical analysis, N_2 pysisorption, XRD and TEM before and after catalytic test.

EXTRACÇÃO SUPERCRÍTICA DO ÓLEO ESSENCIAL DE POEJO (*MENTHA PULEGIUM* L.)

Elsa Reis Vasco

Doutoramento em: *Engenharia Química*

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

Orientadores: *António Manuel Figueiredo Palavra e José Augusto
Paixão Coelho*

Provas Concluídas em: *19 de Dezembro de 2002*

Com o objectivo de realizar estudos de extracção supercrítica de óleos essenciais com dióxido de carbono em matrizes vegetais aromáticas, no intervalo de temperaturas de 298 a 333 K e para pressões até 30,0 MPa, construiu-se uma instalação supercrítica com separação fraccionada. O poejo (*Mentha pulegium* L.), espécie espontânea na flora Portuguesa, foi a matriz vegetal utilizada. Analisou-se o efeito da temperatura de extracção e separação no rendimento da extracção, bem como a velocidade superficial do solvente e o diâmetro médio da partícula da matriz vegetal. Em simultâneo com a extracção supercrítica, utilizou-se a hidrodestilação como técnica convencional, para comparação dos óleos obtidos pelos dois processos. Ambos foram submetidos à análise sensorial, por olfacto, de um painel de provadores, tendo estes mostrado preferência pelo óleo supercrítico, por reproduzir melhor o aroma do poejo fresco. As condições revelaram resultados mais próximos dos obtidos por hidrodestilação, em termos de rendimento e composição, foram a temperatura e a pressão de extracção de 323 K e 10,0 MPa, respectivamente, a velocidade superficial do solvente de $7,1 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$ e o diâmetro médio de partícula de 0,3 mm. Finalmente, utilizaram-se dois modelos para a representação dos resultados experimentais da extracção supercrítica, tendo um deles apresentado maior capacidade na modelação.