

## UMA INTRODUÇÃO AO MODELO DE QUARKS

A.C. Pavão

Departamento de Química Fundamental – UFPE  
50.000 – Recife-PE

Recebido em Abril/85

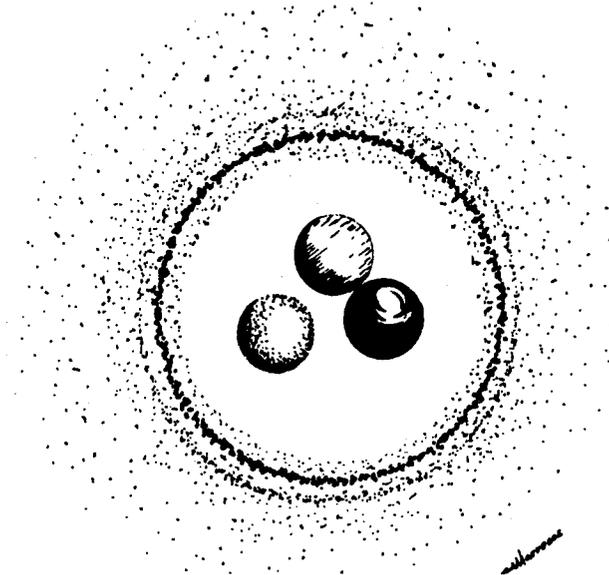
### I. A CONSTITUIÇÃO DA MATÉRIA

Desde a idéia de átomo dos gregos até os dias atuais houve uma grande evolução em nossa compreensão acerca da estrutura da matéria. De um plano especulativo em Leucipo e Demócrito, o átomo atingiu um status de “realidade” a partir da explicação das leis ponderais da química e da observação de sua estrutura interna, com a identificação de prótons e elétrons. Entretanto, a busca de um constituinte último da matéria não chegou a um termo e a questão da divisibilidade, lançada pelos gregos<sup>1</sup>, ainda não foi resolvida em sua essência. A ciência moderna está baseada na visão atomista do mundo, isto é, todos os fenômenos podem ser explicados a partir da interação de pequenas unidades fundamentais. O que tem acontecido, porém, é que quando se identifica uma partícula elementar, imediatamente já surge a questão de sua composição. E esta partícula logo é descrita por outras mais fundamentais. A ciência parece assim mostrar que a divisão é a própria essência do pensamento atomista.

Para Dalton (teoria atômica moderna), o átomo era uma partícula indivisível, mas a chegada do séc. XX evidencia sua estrutura interna e coroava assim os trabalhos de Davy (eletroquímica), Faraday (eletrólise), Arrhenius (teoria iônica), Geissler, Pluecker, Croocks e Goldstein (tubos de descarga), Stoney (quantidade mínima de carga elétrica), Thomson (relação carga/massa para o elétron), Perrin (raios canais), Rutherford, Nagaoka (modelos atômicos), Millikan (determinação da carga do elétron) e de tantos outros que trabalhavam na elucidação da estrutura atômica da matéria<sup>2</sup>. A virada do século abria então novas perspectivas para as ciências físicas, que agora mergulhavam nas águas do vasto mundo atômico, gerando toda esta parafernália tecnológica própria de nosso século (cada divisão é uma revolução).

Posteriormente, com a identificação das partículas componentes do núcleo atômico (Rutherford em 1919 conseguiu a produção de prótons e em 1932 Chadwick identificava o nêutron) já surgiam os elementos de novas divisões nos componentes fundamentais da matéria. A explicação da estabilidade nuclear por Yukawa<sup>3</sup>, em 1935, introduzia mais uma partícula elementar (méson) no quadro relativamente simples (prótons, nêutrons) existentes até então. Em 1947, o número de partículas elementares (observadas em processos nucleares) chegava a uma dezena

e quando em 1961 atingia a casa de meia centena, crescia a descrença neste elevado número de partículas como entidades fundamentais da matéria. Surgiam aí as tentativas de enquadrá-las em uma teoria mais geral. A análise de propriedades de simetria levou a classificações das partículas elementares em multipletos (à semelhança dos níveis de energia de átomos ou moléculas), cujos membros apresentavam características semelhantes (por exemplo, próton e nêutron formam um dubleto. A menor de suas cargas elétricas, são partículas praticamente idênticas). O esquema de classificação que obteve maior sucesso foi o “eightfoldway”<sup>4</sup>, que apresenta uma organização para prótons, nêutrons, mésons e todas as partículas que participam de interações fortes (forças nucleares), análoga a da tabela periódica para os elementos químicos. Destas classificações surgiu a idéia de que as partículas elementares seriam constituídas de elementos mais fundamentais, chamados de quarks<sup>5</sup>. Com o desenvolvimento de aceleradores de alta energia e o progresso da teoria, esta hipótese ganhou força e hoje os quarks, apesar de não terem sido observados isoladamente, são considerados como componentes fundamentais da matéria. A ilustração a seguir mostra uma concepção artística moderna de um núcleon.



## II. PARTÍCULAS ELEMENTARES: QUARKS E LÉPTONS

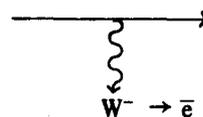
As partículas em experimentos de alta energia são divididas em duas classes: léptons e hadrons<sup>6</sup>. Os léptons (partículas leves) são férmions (spin 1/2) e podem ser eletricamente carregados ou neutros. Todos os léptons participam das interações fracas (forças responsáveis pelo decaimento  $\beta$ , que somente atuam a distâncias  $\leq 10^{-13}$  cm) e aqueles com carga elétrica também interagem eletromagneticamente. Até o presente, três pares de léptons foram identificados: o elétron ( $e^-$ ) e seu neutrino ( $\nu_e$ ), o muon ( $\mu^-$ ), e seu neutrino ( $\nu_\mu$ ) e o ( $\tau^-$ ) com seu neutrino ( $\nu_\tau$ ). Também existem suas respectivas antipartículas, como prevê a mecânica quântica relativista. Os hadrons (partículas pesadas) participam das interações fortes, além da eletromagnética e da fraca, possuem spin inteiro (mésons) ou semi-inteiros (bárions). Existem centenas de hadrons e suas massas variam desde 135 MeV/c<sup>2</sup> para o  $\Pi^0$  até 10.545 MeV/c<sup>2</sup> para o  $\gamma'''$ , descoberto recentemente.

Os léptons parecem não apresentar estrutura interna, como indicam os experimentos com as mais elevadas energias acessíveis atualmente. Resultados obtidos no SLAC (Stanford Linear Accelerator Center) e no DESY (Deutsches Elektronen Synchrotron) estabelecem dimensões para os léptons menores que  $2-3 \cdot 10^{-3}$  fermi (1 fermi =  $10^{-13}$  cm). Outra evidência da característica puntual dos léptons é o sucesso das teorias eletrodinâmicas e das forças fracas (hoje unificadas em uma única teoria, a de Weinberg-Salam das interações eletrofracas<sup>7</sup>) que os descrevem como constituintes fundamentais. Já os hadrons não são considerados partículas elementares, mas sim estados ligados de constituintes mais fundamentais: os quarks<sup>8</sup>. Os mésons são formados por um quark e um antiquark ( $q\bar{q}$ ) e os bárions por três quarks ( $qqq$ ). Um antibarion é formado por três antiquarks ( $\bar{q}\bar{q}\bar{q}$ ). Este esquema permite a descrição de todos os hadrons observados até agora e também tem tido muito sucesso na previsão de novos estados hadrônicos e suas propriedades.

Seis espécies (ou sabores, como são denominadas) de quarks são conhecidos atualmente: up(u), down (d), strange (s), charm (c), bótom (b) e top (t). Todos os quarks são férmions (spin 1/2) e possuem cargas elétricas fracionárias: para os sabores d, s e b a carga é  $-1/3e$  enquanto u, c e t carregam  $+2/3e$ . Os hadrons não têm cargas fracionárias e esta condição é obtida pela combinação conveniente de quarks. Por exemplo, próton (p): uud; nêutron (n) udd; lambda ( $\Lambda^0$ ): usd; ômega ( $\Omega^-$ ): sss; píon ( $\pi^+$ ): u $\bar{d}$ ; Kaon ( $\kappa^+$ ): us; Charmonium:  $c\bar{c}$ . Ao contrário dos sistemas nucleares, onde aparecem combinações de diferentes números de núcleons ( $^2\text{H}, ^3\text{H}, ^3\text{He}, \dots, ^{235}\text{U}$ , etc.), na espectroscopia de hadrons, somente as combinações de dois ( $\bar{q}q$ ) e três ( $qqq$ ) quarks são permitidas. Sistemas como  $q, qq, qq\bar{q}, qq\bar{q}q$  não aparecem no espectro físico. Há algumas suspeitas de que um sistema do tipo  $qq\bar{q}\bar{q}$  (algo parecido com uma "molécula" de mésons) poderia existir, mas a teoria para tais estados ainda é motivo de controvérsias<sup>9</sup>. Um exemplo interessante da aplicação do modelo de quarks ocorre na descrição do decaimento  $\beta^-$ . Este processo, que representa a instabilidade do nêutron,  $n \rightarrow p + \bar{e} + \nu$ , ganha agora uma nova interpretação:

### NEÚTRON

u  
d  
d



### PRÓTON

u  
u  
d

O nêutron se transforma num próton quando o quark de sabor d muda para o sabor u e emite uma partícula  $W^-$  (bóson  $W^-$ ), que possui um tempo de vida muito curto e logo decai pela emissão de um elétron e um antineutrino. O bóson  $W^-$  foi detectado no final de 82 no CERN (Centre European de la Recherche Nucleaire), em Genebra, oferecendo assim mais uma evidência experimental para o modelo de quarks. Todo o conhecimento atual acerca de quarks é proveniente de análise do comportamento dos hadrons em experimentos de espalhamento a altas energias. Não foi possível até agora isolar quarks. Parece que estas partículas permanecem confinadas nos limites hadrônicos ( $\sim 1$  fermi). Isto leva a algumas suspeitas de que talvez os quarks sejam artefatos criados pela teoria e não entidades reais. Entretanto, ainda não existem provas definitivas para o confinamento de quarks e esta é uma questão central no modelo, tanto teórica como experimental.

Outro ponto que tem chamado atenção ultimamente é que os quarks talvez não sejam ainda os constituintes últimos da matéria. É possível que eles sejam constituídos de outras entidades mais fundamentais<sup>10</sup>.

## III. A COR E A CROMODINÂMICA QUÂNTICA

Pouco tempo depois da elaboração do modelo de quarks (proposto independentemente por Gell-Mann e Zweig em 1964), surgiu um aparente paradoxo na descrição dos hadrons. Como os quarks são férmions, todos os estados quânticos formados por estas partículas devem ser anti-simétricos, ou seja, a função de onda do hadron deve mudar de sinal por uma troca de dois quarks idênticos. Para os mésons, a estatística de Fermi é totalmente obedecida, mas para certos bárions, como o  $\Omega^-$  (formado por três quarks de sabor s) ou o  $\Delta^{++}$  (formado por três quarks u) parecia ocorrer uma violação daquela estatística. No caso do bárion ômega  $\Omega^-$  (sss), por exemplo, sua função de onda deve ser anti-simétrica ( $\psi_a$ ) pela troca de coordenadas de quaisquer dos quarks s. A função de onda  $\psi_a$  do bárion é produto das funções de onda que descrevem a parte espacial ( $\phi$ ) e a de spin, ( $\chi$ ). É conhecido, porém, que este bárion tem spin total igual a 3/2 (o que significa os três spins paralelos e uma função de onda spin simétrica, isto é,  $\chi_s$ ). Sabe-se também que os três quarks estão no estado mais baixo de energia, com momento angular nulo (o que implica também numa função de onda simétrica, isto é,  $\phi_s$ ). Portanto  $\phi_s \cdot \chi_s$  dará uma função de onda total simétrica, e não anti-simétrica como requer a estatística de Fermi. Esta contradição é resolvida ao se admitir que os quarks podem ser distinguidos por uma nova variável (isto é, um novo número quântico): a cor. Assim cada sabor de quark pode carregar três cores diferentes: vermelha, azul e amarela. Com a introdução da cor, admite-se que a função de onda total do bárion será

anti-simétrica pela troca dos índices de cor de quaisquer dos quarks e o paradoxo não mais existe: os quarks se comportam como férmions pela troca de todas suas coordenadas, incluindo as coordenadas de cor.

A admissão da cor é uma hipótese necessária para a explicação correta da simetria nas funções de onda dos bárions, mas encontra também respaldo em outras observações experimentais. Por exemplo, a taxa de decaimento do pion neutro em dois fótons ( $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ ), aumenta por um fator de  $9=3^2$  quando se considera quarks com cor, exatamente o fator necessário para obter uma concordância entre a previsão teórica e as observações experimentais.

A escolha de cores para denominar este novo número quântico é até certo ponto arbitrária. É apenas uma questão de conveniência, uma vez que os hadrons não carregam cor e a combinação de um quark e um antiquark nos mésons ou de três quarks nos bárions devem conduzir a estados incolores. Nos bárions, a combinação de dois de seus quarks deve produzir o complemento da cor (a anticor) do terceiro quark e gerar assim um estado final incolor.

Os hadrons são descritos por combinações de quarks e a teoria da dinâmica de interação entre estas partículas coloridas é chamada de Cromodinâmica Quântica (Quantum Chromodynamics - QCD)<sup>11</sup>. A QCD é uma teoria bastante similar à teoria da Eletrodinâmica Quântica (Quantum Electrodynamics - QED), que descreve às partículas com interação eletromagnética. Em ambas existem campos vetoriais que interagem com partículas que possuem certas propriedades: a carga elétrica no caso da QED e a cor na QCD. Da mesma forma que a carga é conservada na QED; a cor também o é na QCD. Na QED existe uma carga e sua anticarga que podem se aniquilar com a produção de radiação ou então formar sistemas estáveis (átomo, por exemplo). Na QCD existem três diferentes cores, e suas anticores, que podem formar partículas incolores. Há porém, uma diferença importante entre estas duas teorias. Na QED existe apenas um campo vetorial, o campo eletromagnético, cujos quanta são os fótons. Na QCD existem oito campos vetoriais, os campos de cor, cujos quanta são chamados de

gluons. Tanto fótons como gluons são bosons (spin 1). Enquanto o campo eletromagnético é neutro (e os fótons, embora interagindo com cargas elétricas, não possuem carga), os campos de gluons carregam cores e por isso interagem entre si (mas os gluons não possuem carga elétrica). Assim, ao contrário do elétron que ao emitir ou absorver um fóton continua como um elétron, a emissão ou absorção de um gluon pode mudar o estado de cor do quark.

Apesar do QCD descrever corretamente os hadrons e permitir a compreensão de um elevado número de observações experimentais existentes na área da física de altas energias, ela é ainda uma teoria na infância. Atualmente a QCD é muito mais fenomenológica do que quantitativa. São poucos os resultados rigorosos que apresenta e carrega ainda problemas fundamentais à espera de solução. Um deles se refere ao confinamento de quarks e gluons<sup>12</sup>.

Enquanto elétrons e fótons interagem através de forças relativamente fracas (com a baixa energia é possível observá-los isoladamente), no caso de quarks e gluons a situação é mais complexa. A pequenas distâncias (dentro dos hadrons), o acoplamento de quarks e gluons é pequeno (e pode-se afirmar que quarks e gluons estão livres), mas quando a distância excede os limites hadrônicos, a interação se torna muito grande e aumenta quanto maior é a separação, impedindo a observação destas partículas como sistemas isolados. Não existe até agora uma descrição satisfatória para este tipo de comportamento e o confinamento da cor é ainda um problema em aberto na QCD.

Para a descrição do núcleo atômico foi muito importante estabelecer uma analogia com modelos da física atômica e molecular. O modelo de camadas, por exemplo, é surpreendentemente adequado à descrição da estrutura de núcleons no núcleo<sup>13</sup>. A curva de energia potencial versus separação dos átomos em uma molécula é muito parecida com a curva de potencial de separação de núcleons. De uma forma análoga, átomos e hadrons também apresentam curvas de potencial bastante semelhantes<sup>9</sup> (veja figura 1). Isto tem sido muito explorado ultimamente para se buscar uma base mais quantitativa para a QCD.

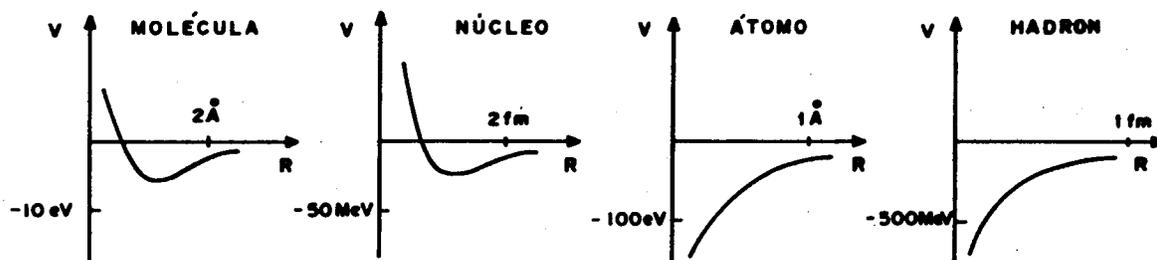


Fig. 1 Curvas de potencial  $\times$  separação para os constituintes de moléculas, núcleos, átomos e hadrons.

#### IV. QUÍMICA DE QUARKS

O grande sucesso do QCD tem reforçado a expectativa que quarks talvez possam ser observados com partículas reais. Em 1910, Millikan<sup>14</sup> em suas experiências para a determinação da carga do elétron, observou “um valor de carga na gota 30% menor que o valor final de  $e$ ”. Na época isto foi atribuído a erros experimentais (provocados pela rápida evaporação das gotas de água utilizadas naquelas medidas), mas com o surgimento do modelo de quarks, o fato adquiriu novas dimensões e suspeitou-se ter sido esta a primeira observação de quarks livres na matéria. A partir daí, a experiência de Millikan foi revivida, mas agora através de técnicas mais precisas. Os resultados, entretanto, não chegam a ser completamente convincentes. Em 1981, LaRue, Phillips e Fairbank<sup>15</sup>, usando campos elétricos e magnéticos para obter a levitação de esferas de nióbio, relataram a observação de cargas fracionárias do tipo  $1/3e$ . Entretanto outra experiência muito parecida com esta, realizada por Marinelli e Morpurgo<sup>16</sup>, não revelou a existência destas cargas fracionárias. Muitos outros experimentos foram também realizados, incluindo colisões de partículas a altas energias<sup>17</sup>, mas não conduzem a resultados conclusivos. De qualquer forma, a dúvida neste caso só vem a favor do modelo de quarks e cada vez é maior a crença na possibilidade de existência de quarks livres.

E como se justifica a existência de quarks fora dos limites hadrônicos? Eles deveriam permanecer indefinidamente confinados em núcleons e mésons e como tal não poderiam ser observados isolados na matéria estável. Uma hipótese, que em princípio não contradiz a camisa de força do confinamento, é que poderiam existir hoje quarks livres que são sobreviventes de algum período na história da formação do universo. A partir do Big Bang<sup>18</sup>, a grande explosão que teria dado início ao universo (embora atualmente se fale até numa era pré-Big-Bang), houve um processo de expansão e resfriamento com a conseqüente condensação da matéria — (veja figura 2).

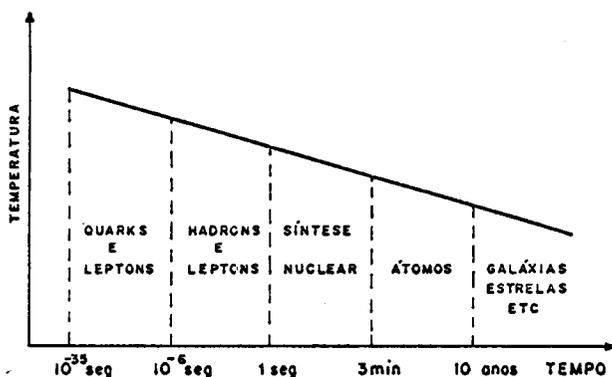


Fig. 2. Estágios de evolução do universo de acordo com o modelo do Big Bang.

Depois de um certo estágio inicial, passaram a existir quarks e léptons. Neste período, os quarks estavam livres mas depois, quando a temperatura caiu, eles se combinaram

( $qqq$  ou  $q\bar{q}$ ) e deram origem aos hadrons. A etapa seguinte foi a da síntese nuclear, onde foram formados inicialmente os núcleos mais leves (H, He, Li, . . .). Os átomos pertencem a um período posterior, quando núcleos se combinam com elétrons. A partir daí aparecem galáxias, estrelas, planetas, moléculas complexas, abelhas, homens e até este autor. A hipótese de quarks livres admite que, no burburinho da condensação de hadrons, nem todos os quarks teriam encontrado seus “partners” e alguns deles teriam sobrevivido até nossos dias<sup>19</sup>. Não seriam muitos, e por isso se estima que estejam em concentrações extremamente reduzidas, da ordem de  $10^{-21}$  molar ou menor ainda.

Evidentemente, a detecção de quarks livres é de extremo interesse para a consolidação da QCD como uma teoria para os hadrons. Nas experiências para a observação de quarks livres é necessário o conhecimento da química destas partículas com cargas fracionárias, isto é, como se comporta uma carga do tipo  $1/3e$  na matéria?<sup>20</sup>. Uma questão importante é saber onde elas residem hoje na matéria estável. Poderiam estar isoladas, e como carregam cargas elétricas, estariam interagindo com átomos, moléculas ou cristais, possivelmente formando estruturas estáveis. Outra possibilidade é que, como quarks devem ter um grande apetite pela matéria nuclear (eles provêm da matéria nuclear), eles absorveriam hadrons, o que levaria então à formação de núcleos com cargas fracionárias. Neste caso, a existência de cargas fracionárias no núcleo de um átomo provocará modificações na estrutura eletrônica e, em princípio, uma técnica espectroscópica adequada poderá observar estes quarks. Já existem tentativas neste sentido. Fairbank Jr<sup>21</sup> desenvolveu uma técnica para detectar átomos de sódio em concentrações de até um átomo por  $\text{cm}^3$ . Devido à esperada baixa concentração de quarks livres, esta técnica é útil na procura de partículas coloridas. Depois que um átomo com carga fracionária é excitado (usa-se um laser), ele pode ser detectado observando sua fluorescência ressonante. Até agora, porém, não há nenhum resultado positivo com este tipo de experiência.

Muitas questões relativas à química de quarks ainda estão à espera de tratamentos. Alguns autores têm calculado valores de eletronegatividades, raios iônicos (úteis para o estudo de possíveis substituições isomórficas em cristais), energias eletrônicas e outras propriedades de átomos com cargas nucleares fracionárias<sup>10,22</sup>. Também moléculas constituídas de átomos com quarks têm sido investigadas<sup>23</sup>. Esta é uma nova área que se abre para a química, que assim permanece coerente com um de seus principais objetivos: a constituição da matéria.

#### Referências:

- <sup>1</sup> No poema “De Rerum Natura” do poeta Lucrécio (95a.C. (?) — 55 a.C.(?) se encontra uma exposição significativa dos mais importantes conceitos filosóficos e científicos desta época.
- <sup>2</sup> Veja, por exemplo, J.M.F. Bassalo, Revista de Ensino de Física 2, 58 (1980).
- <sup>3</sup> H. Yukawa, Proc. Phys., Math Soc. Japan, 17, 48 (1935).
- <sup>4</sup> M. Gell-Mann, Caltech Sync. Lab. Report, CTSL-20 (1961); Y.Ne’eman, Nucl. Phys. 26, 222 (1961).

- <sup>5</sup> M. Gell-Mann, Phys. Lett. 8, 214 (1964); G. Zweig, CERN preprint TH 412 (1964).
- <sup>6</sup> Veja, por exemplo, M.J. Longo, "Fundamentals of Elementary Particle Physics", MacGraw-Hill, Tokyo, 1973; J.S. Trefil, "From Atoms to Quarks", Charles Scribner's Sons - New York, 1980.
- <sup>7</sup> Veja artigo de G.B. Levi, Phys. Today 36, 17 (April 1983) sobre a descoberta do boson W que comprova a teoria de Weinberg - Salam.
- <sup>8</sup> J.M.F. Bassalo, Revista de Ensino de Física 3, 13 (1981); F.E. Close, "An Introduction to Quarks and Partons", Academic Press - 1979.
- <sup>9</sup> N. Isgur e G. Karl, Phys. Today 36, 36 (november 1983).
- <sup>10</sup> H. Harari, Scientific American, April 1983, p. 48.
- <sup>11</sup> D.B. Lichtemberg, Contem. Phys. 22, 311 (1981); W. Marciano e H. Pagels, Nature 279, 479 (1979); S. Gasiorowics e J.L. Rosner, Am. J. Phys. 49, 954 (1981).
- <sup>12</sup> A. De Rújula, R. C. Giles e R.L. Jaffe, Phys. Rev. D. 17, 285 (1978); J.F. Donoghue, Comm. Nucl. Part. Phys. 10, 277 (1982).
- <sup>13</sup> H. Enge, "Introduction to Nuclear Physics", Addison - Wesley Publishing Company, 1966.
- <sup>14</sup> R.A. Millikan, Phil. Mag. 19, 209 (1919).
- <sup>15</sup> G. LaRue, J.D. Phillips e W.M. Fairbank, Phys. Rev. Lett. 46, 967 (1981).
- <sup>16</sup> M. Marinelli e G. Morpurgo, Phys. Rep. 85, 162 (1982).
- <sup>17</sup> M.A. Lindgren e colaboradores, Phys. Rev. Lett. 51, 1621 (1983).
- <sup>18</sup> Veja, por exemplo, S. Weinberg, "Os Três Primeiros Minutos", Guanabara Dois, 1980; D.N. Schramm, Phys. Today 36, 27 (April 1983).
- <sup>19</sup> K.S. Lackner e G. Zweig, Phys. Rev. D28, 1671 (1983).
- <sup>20</sup> C.K. Jørgensen, Structure and Bonding 43, 1 (1981).
- <sup>21</sup> W.M. Fairbank Jr., "Measurements of Very Low Sodium Vapor Densities By Laser Fluorescence Spectroscopy", PhD Thesis, Stanford University, 1974.
- <sup>22</sup> A.C. Pavão - "Quark - Antiquark pair stabilization and electronic structures of fractionally Charged atoms", submetido para publicação no Phys. Rev. D.
- <sup>23</sup> L.J. Schaad e Colaboradores, Phys. Rev. A23, 1600 (1981).

## ARTIGO

### QUIMIOMETRIA

Roy E. Bruns e J.F.G. Faigle

*Instituto de Química  
Universidade Estadual de Campinas  
C.P. 6154 - 13.100 Campinas, - S.P.*

Recebido em 02/04/84

## INTRODUÇÃO

A quimiometria é a parte da química que utiliza métodos matemáticos e estatísticos para:

- definir ou selecionar as condições ótimas de medidas e experiências e
- permitir a obtenção do máximo de informações a partir da análise de dados químicos.

Com a sofisticação sempre crescente das técnicas instrumentais, impulsionada pela invasão de microprocessadores e microcomputadores no laboratório químico, tornam-se necessários tratamentos de dados mais complexos do ponto de vista matemático e estatístico, a fim de relacionar os sinais obtidos (intensidades, por exemplo) com os resultados desejados (concentrações). Muita ênfase tem sido dada aos sistemas multivariados, nos quais se pode medir muitas variáveis simultaneamente (ou de forma seqüencial, com grande eficiência) ao se estudar uma amostra qualquer. Nesses sistemas, a conversão da resposta instrumental no dado químico de interesse, requer a utilização de técnicas

de estatística multivariadas, álgebra matricial e análise numérica. Essas técnicas se constituem no momento na melhor alternativa para a interpretação de dados e para a aquisição do máximo de informações sobre o sistema.

De todos os ramos da química clássica, talvez a química analítica tenha sido a mais afetada pelo desenvolvimento recente da instrumentação química, associada a computadores. De fato, a "Chemometrics Society", organização internacional dedicada ao uso e desenvolvimento de métodos em quimiometria, é composta principalmente por químicos interessados em problemas analíticos. Atualmente é muito raro se encontrar qualquer periódico respeitável sobre pesquisa em química analítica, que não traga artigos reportando dados obtidos com o auxílio de microprocessadores, ou tratados por matemática multivariada ou métodos estatísticos, sempre com o objetivo de melhorar a qualidade dos resultados ou facilitar a sua interpretação.

Outras áreas em química vêm sendo também influenciadas pela quimiometria. Os métodos espectrométricos comumente empregados em química orgânica e inorgânica, tornam-se muito mais poderosos quando acoplados a técnicas