

Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

5,00 € - Distribuição
gratuita aos sócios da SPQ

janeiro-março
Vol. 45 | N.º 160 | 2021

Química





Editorial | 2

Secretário-Geral | 3

Notícias

4

Livros | 11

Interação Química

13

Vasco Matos Trigo

Atualidades Científicas | 19

Ongoing

25

URE-LOCKERS: Inibição da Urease com Terapias de Nova Geração | 25

Novas Moléculas Pequenas para Optoeletrónica | 26

Artigos

27

Rumo ao Estado Nativo com Ressonância Magnética Nuclear | 27

Uma Catálise Alternativa Mais Sustentável: Ensinamentos da Química Verde | 33

Captura e Conversão de Dióxido de Carbono: a Promoção de um Resíduo a Produto de Valor Acrescentado | 38

Gás Natural Sintético a partir de Dióxido de Carbono: Um “Challenge Accepted!” para os Zeólitos | 44

Dióxido de Carbono Supercrítico: Uma Alternativa para uma Síntese Mais Sustentável | 49

Ensino

53

Nomenclatura Química – Paradigmas Novos: a Implementação das Novas Regras na Nomenclatura Química em Manuais Escolares do 8.º Ano de Escolaridade | 53

Nas Redes | 61

Química Entre Nós | 62

Espaço dos Mais Novos | 65

Destakes | 68

Agenda | 70



Na publicação *The economics of climate change: no action not an option* do *Swiss Re Institute* sobre o impacto económico das alterações climáticas, estima-se que nos próximos trinta anos o mundo possa perder 11 a 14% do valor económico total se o aumento da temperatura do planeta se mantiver ao ritmo atual. Num cenário em que o Acordo de Paris e as metas de emissões para 2050 são cumpridas, a estimativa é de uma retração no PIB global de 4,2%. Países com economias mais poderosas, como o Canadá, Estados Unidos e Alemanha, estão entre os dez menos vulneráveis; Portugal encontra-se num honroso quarto lugar, logo a seguir à Finlândia, Suíça e Áustria. Tendo em conta que as economias mais

vulneráveis aos riscos inerentes às alterações climáticas (essencialmente as dos países do Sudeste Asiático e América Latina) são aquelas que irão sustentar o crescimento económico global nos próximos anos, é fundamental continuar a agir para enfrentar este problema. Desde o início da revolução industrial e com o uso concomitante de recursos fósseis, a concentração de dióxido de carbono na atmosfera tem aumentado significativamente. Este crescimento é geralmente considerado o principal motivo do aquecimento global do planeta, pelo que ao dióxido de carbono costuma atribuir-se uma conotação extremamente negativa. No entanto, tal como uma moeda possui duas faces, o CO₂ acarreta também desafios e oportunidades na exploração das suas potencialidades. O problema das alterações climáticas colocou (ainda mais) o dióxido de carbono nas *luzes da ribalta* da investigação científica. De facto, os temas da captura, armazenamento e utilização do CO₂ têm merecido uma atenção especial da comunidade académica e industrial nos últimos anos. Enquanto os primeiros dois temas lidam diretamente com os problemas das emissões de CO₂, há um interesse crescente em utilizar o CO₂ para obter produtos de valor acrescentado, gerando lucros que podem ser usados para subsidiar os custos da sua captura e armazenamento, promovendo a chamada economia circular de carbono e contribuindo para um desenvolvimento global mais equilibrado.

Neste número, três jovens investigadoras, Sara Realista, Maria Bacariza e Rita Pires, escrevem sobre a captura e valorização do CO₂ e como este pode ser utilizado na promoção de sínteses químicas mais sustentáveis, provando mais uma vez que a Química e os químicos (*os suspeitos do costume...*) desempenham um papel fundamental para o bem-estar da Humanidade. No contexto do tema da sustentabilidade, num outro artigo, Nuno Martins aplica os ensinamentos da química verde no estudo de um processo catalítico alternativo. *E agora para algo completamente diferente*, João Medeiros-Silva explica como os recentes avanços em RMN de estado sólido possibilitam investigar biomoléculas no seu estado nativo. Este artigo veio na sequência do PYCA (*Portuguese Young Chemists Award*) 2020, atribuído pelo Grupo de Químicos Jovens da SPQ, premiando o autor pelo trabalho desenvolvido durante o seu Doutoramento e pela capacidade de o comunicar à sociedade na forma de um texto de divulgação científica. Refira-se que no mesmo concurso, os trabalhos de Sara Realista e de Nuno Martins, publicados neste número, receberam uma menção honrosa. Ainda no contexto de prémios, estão de parabéns os vencedores das recentes edições do Prémio Alberto Romão Dias, do Prémio Ferreira da Silva, da Medalha Vicente de Seabra e do Prémio Luso-Francês, atribuídos sob os auspícios da SPQ. O Prémio Mariano Gago, atribuído pela Sociedade Portuguesa de Autores, também foi notícia. A finalizar, convido o leitor a espreitar a nova página web do QUÍMICA, em b-quimica.spq.pt, com ligação através do separador "Publicações" da página web da SPQ. Quem sabe, talvez sinta uma motivação adicional para submeter um texto ao principal meio de informação impresso da SPQ...

>

Paulo Mendes

BOLETIM DA SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

PROPRIEDADE DE SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

NIPC: 501 139 265

ISSN 0870 – 1180

Registo na ERC n.º 125 525

Depósito Legal n.º 51 420/91

Publicação Trimestral

N.º 160, janeiro-março 2021

REDAÇÃO E ADMINISTRAÇÃO

Av. da República, 45 – 3.º Esq. – 1050-187 Lisboa

Tel.: 217 934 637 • Fax: 217 952 349

bspq@uevora.pt • www.spq.pt

Diretor: Paulo Mendes

Diretores-adjuntos: Ana Paula Esteves, Bruno Machado, Maria José Lourenço, Marta Piñeiro Gómez, Vasco D.B. Bonifácio

Comissão de Aconselhamento Editorial:

Augusto Tomé, Helder T. Gomes, João Paulo R. F.

André, Joaquim L. Faria, Jorge Morgado, Mário N.

Berberan-Santos

ESTATUTO EDITORIAL

Disponível em:

www.spq.pt/boletim/estatuto_editorial

PUBLICIDADE

Sociedade Portuguesa de Química

secretariado@spq.pt

DESIGN GRÁFICO E PAGINAÇÃO

Rodrigo Nina

www.rodrigonina.com

rodrigo.pnina@gmail.com

Tel.: 964 819 822

IMPRESSÃO E ACABAMENTO

Tipografia Lessa

Pta dos Mogos, 157 – Z. Ind. de Vermoim

4470-343 Maia

+351 229 441 603

geral@tipografialessa.pt

Tiragem: 1.500 exemplares

As colaborações assinadas são da exclusiva responsabilidade dos seus autores, não vinculando de forma alguma a SPQ, nem a Direção do QUÍMICA. São autorizadas e estimuladas todas as citações e transcrições, desde que seja indicada a fonte, sem prejuízo da necessária autorização por parte do(s) autor(es) quando se trate de colaborações assinadas. As normas de colaboração e as instruções para os autores podem ser encontradas no sítio web da SPQ.

PUBLICAÇÃO SUBSIDIADA PELA

FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Apoio do Programa Operacional Ciência, Tecnologia, Inovação do Quadro Comunitário de Apoio III

Sociedade Portuguesa de Autores Atribui Prémio Mariano Gago ao Professor João Monte pelo seu Livro *O Bairro da Tabela Periódica*

No passado dia 25 de maio, por ocasião da celebração do Dia do Autor Português e do 96.º aniversário da Sociedade Portuguesa de Autores (SPA), foi entregue a João Monte, Professor Jubilado da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, o prémio Mariano Gago. Este prémio foi criado em 2018 pela SPA e visa estimular a divulgação da investigação científica, premiando e dando notoriedade pública às obras de carácter científico.

A obra premiada, *O Bairro da Tabela Periódica*, foi publicada pela Editora da Universidade do Porto em 2019, contando com o patrocínio da Sociedade Portuguesa de Química, numa singela homenagem do autor às celebrações do *Ano Internacional da Tabela Periódica* decretado pela *Assembleia Geral das Nações Unidas*.

No âmbito das celebrações do AITP2019 a SPQ decidiu levar à cena esta obra tendo para o efeito contratado os serviços do encenador Mário Montenegro e da companhia Marionet de Coimbra. Durante o referido ano a companhia efetuou uma *tournee* pelas principais zonas metropolitanas do país, com exposições em Carnaxide (Teatro Rui de Carvalho), Coimbra (Teatro Gil Vicente) e Porto (Teatro Helena Sá da Costa). A *tournee* redundou num estrondoso sucesso tendo a atuação do elenco de atores dirigidos por Mário Montenegro sido vista por mais de 3200 espectadores presenciais.

A finalizar deixamos a opinião de três conceituados cientistas sobre a obra do Manuel João Monte, juntando-nos ao coro dos que aplaudem esta obra e que aguardam ansiosos pela encenação da sua nova obra, que visita um dos apartamentos de *O Bairro da Tabela Periódica: O Arsenicum*.

“Cheio de surpresas curiosas e revelações fascinantes, este texto denuncia também a evidência de que, até nos elementos, conseguimos discriminar o género feminino. E, de forma subtil, enquanto transmite noções fundamentais da química deixa-nos entretidos. *Enjoy it as I did!*”
Alexandre Quintanilha

“Manuel João Monte sonhou estes mesmos elementos, que hoje já são 118, arrumados nos seus quatro blocos para discutir as suas diferentes afinidades e antagonismos. É da diversidade que se faz a Química e também este mundo onde vivemos



e de que somos feitos nós próprios. A Química dá força a um argumento que junta os dramas da vida humana com o grande drama da natureza.”

José Ferreira Gomes

“Há um bocado de tudo, desde referências ao *Big Bang* e à matéria escura, a uma interessante discussão sobre a dicotomia de identidade-efemeridade dos elementos radioativos e transurânicos ... Por tudo isto e muito mais, “*O Bairro da Tabela Periódica*” de Manuel João Monte é um texto de muito grande valor pedagógico e que merece uma leitura atenta.”

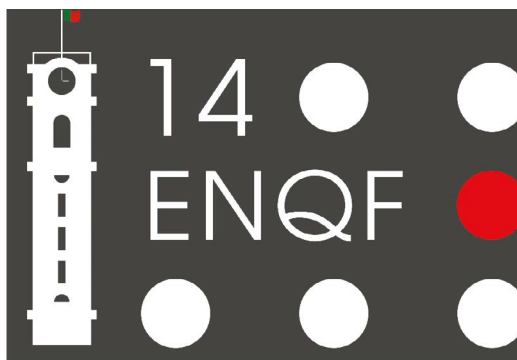
Orfeu Bertolami



>

Adelino Galvão

Professor Auxiliar do Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa. Desenvolve o seu trabalho de investigação no Centro de Química Estrutural na área da Fotoquímica Computacional. É Secretário-Geral da SPQ desde 2017. adelino@tecnico.ulisboa.pt
ORCID.org/0000-0002-4740-0613



14.º Encontro de Química Física e 3.º Simpósio de Química Computacional

A Divisão de Química Física realizou o seu Encontro em formato digital nos dias 29, 30 e 31 de março de 2021. A organização do 14.º Encontro de Química Física foi sediada no Departamento de Química da Universidade de Coimbra, tendo contado também com a colaboração de colegas de outras universidades. Como forma pioneira de divulgação do Encontro, entre novembro de 2020 e fevereiro de 2021, a Comissão Organizadora convidou os professores Fernando Pina, Tito Trindade, Alberto Canelas Pais, Maria das Dores Ribeiro da Silva e Mário Berberan Santos a proferirem palestras em *streaming* acerca dos seus temas de investigação. Todas estas palestras foram seguidas na plataforma *Youtube* por algumas dezenas de pessoas.

Em simultâneo com o 14.º Encontro de Química Física, foram também realizados o 3.º Simpósio de Química Computacional e uma Ação de Formação

para professores dos Ensinos Básico e Secundário. Inscreveram-se nestes três eventos um total de 230 participantes e as sessões científicas tiveram uma participação bastante significativa. O programa contou com um total de 70 comunicações orais (algumas de investigadores de instituições estrangeiras), das quais seis foram lições plenárias e sete comunicações convidadas, cobrindo vários temas da Química Física. Por outro lado, três oficinas foram incluídas no programa da Ação de Formação. A sessão de *posters* contou com a exibição de pequenos vídeos de apresentação dos diferentes trabalhos, os quais contabilizaram mais de três mil visualizações na plataforma *Youtube*. Dos 78 *posters* submetidos, a Comissão Científica selecionou os três melhores:

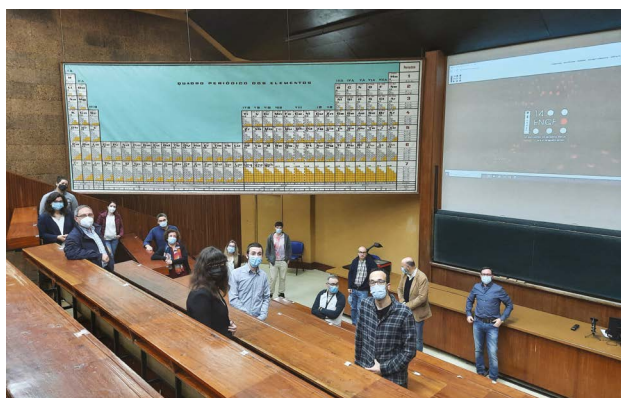
1) *Data Driven Tools to Select Corrosion Inhibitors*, Tiago L. P. Galvão, Gerard Novell-Leruth, Alena Kuznetsova, Inês Ferreira, João Tedim, José R. B. Gomes.

2) *Luminescent aqueous inks and coating formulations with RGB-tunable emission*, B. O. Gomes, R. Aguado, A. J. M. Valente.

3) *H-Tunneling Activated by Vibrational Excitation*, José P. L. Roque, Cláudio M. Nunes, Luís P. Viegas, Nelson A. M. Pereira, Teresa M. D. V. Pinho e Melo, Rui Fausto.

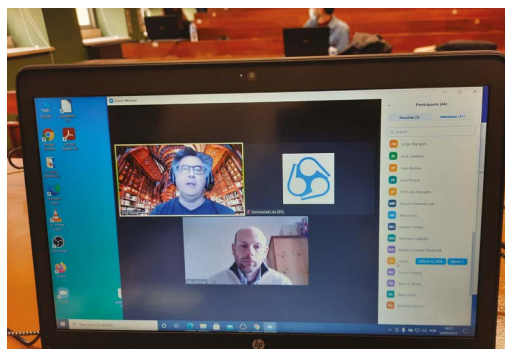
Os prémios, no valor de 100 euros, atribuídos a cada um destes *posters* foram entregues na Sessão de Encerramento do Encontro, que contou com a participação do Vice-Presidente da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). Já na Sessão de Abertura, a Direção da SPQ fez-se representar pelo seu Presidente, Artur Silva.

Apesar do modelo não presencial que teve de ser adotado devido às restrições impostas pela situação



Comissão Organizadora.

pandémica da COVID-19, o 14.º Encontro de Química Física revelou-se um excelente fórum de discussão e partilha de conhecimento científico. O empenhamento de todos os elementos da Comissão Científica, a quem ficamos em dívida, foi fundamental para o sucesso deste evento. A Comissão Organizadora agradece à Direção e ao Secretariado da SPQ todo o apoio prestado e aos patrocinadores pelo suporte financeiro. Um agradecimento especial é devido ao Departamento de Química da Universidade de Coimbra e ao Centro de Química de Coimbra pelo suporte institucional. Finalmente, estamos gratos a todos os participantes pela sua contribuição e entusiasmo!



Pormenor de uma das palestras (Miguel Jorge) no 1.º dia do Encontro.

>

Jorge Marques

qtmarque@ci.uc.pt

Prémio Ferreira da Silva 2020 e Medalha Vicente de Seabra 2020

O júri do Prémio Ferreira da Silva 2020 e da Medalha Vicente de Seabra 2020 reuniu a 7 de abril de 2021, e atribuiu por unanimidade ambas as distinções. O Prémio Ferreira da Silva 2020 distinguiu Mário Nuno Berberan e Santos, Professor Catedrático e líder do Grupo de Biospectroscopia e Interfaces no Instituto de Bioengenharia e Biociências, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, Presidente da SPQ entre 2010 e 2013. A Medalha Vicente de Seabra 2020 foi atribuída a Gonçalo Bernardes, líder do Grupo de Biologia Química e Biotecnologia Farmacêutica no Instituto de Medicina Molecular, Faculdade de Medicina, Universidade de Lisboa.

Os interesses científicos do Professor Mário Nuno Berberan e Santos incluem a luminescência de sistemas nanoestruturados, em especial fulerenos e outros compostos de carbono, e a dinâmica de processos envolvendo estados eletrónicos excitados, nomeadamente a fluorescência retardada por ativação térmica (TADF) e respetivas aplicações como sondas de oxigénio e de temperatura e OLEDs.

A investigação do Doutor Gonçalo Bernardes está focada em terapêuticas direcionadas ao tratamento do cancro, e desenvolvimento de ferramentas para a modificação de proteínas específicas associadas a várias doenças, incluindo a doença de Parkinson.



Mário Nuno Berberan e Santos



Gonçalo Bernardes

Os prémios serão entregues durante o XXVII Encontro Nacional da SPQ, que se realizará em Braga de 14 a 16 de julho de 2021. Durante o evento, os premiados darão uma palestra sobre os mais recentes avanços da sua investigação.

As listas de todos os vencedores dos Prémios Ferreira da Silva e Vicente de Seabra podem ser consultadas em spq.pt/premios/ferreira-silva/lista e spq.pt/premios/vicente-seabra/lista.

>

Bruno Machado

brunofm@fe.up.pt

Prémio Alberto Romão Dias Atribuído a João Rocha

João Rocha, Professor Catedrático de Química na Universidade de Aveiro e Diretor do Instituto de Materiais de Aveiro-CICECO, foi o vencedor da edição de 2021 do Prémio Alberto Romão Dias. Este prémio, instituído pela Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) em 2009, é atribuído bienalmente a um químico que se tenha distinguido pela alta qualidade, originalidade e autonomia do trabalho de investigação, desenvolvido em Portugal, na área de Química Inorgânica e Organometálica.

Os interesses científicos do Professor João Rocha situam-se maioritariamente na área dos nanomateriais inorgânicos funcionais e híbridos orgânico-inorgânico e as suas múltiplas aplicações, e métodos de caracterização dos materiais, incluindo RMN de estado sólido. Recentemente, foi publicada uma *Interação Química* com o premiado, onde se fala sobre o seu percurso académico (*Química*, **2020**, 44, 89-93).

O Prémio será entregue durante a conferência da Divisão de Química Inorgânica e Bioinorgânica da SPQ (13ibcc.events.chemistry.pt), onde o premiado proferirá uma Lição Convidada.



A lista de todos os vencedores do Prémio Alberto Romão Dias pode ser consultada em spq.pt/premios/romao-dias/lista.

>

Bruno Machado
brunofm@fe.up.pt

Prémio Luso-Francês 2021 para o Professor Pierre Dixneuf



Pierre Dixneuf, Professor Investigador Emérito da Universidade de Rennes, França, foi galardoado com o Prémio Luso-Francês 2021, prémio instituído pela SPQ e pela Sociedade Francesa de Química, pelo seu notável trabalho e pelos fortes laços estabelecidos com os químicos portugueses.

As suas principais áreas de investigação envolvem a ativação/funcionalização da ligação C-H para ligações C-C e C-heteroátomo através de reações de acoplamento cruzado, catalisadores de metátese de olefinas e aplicações de óleos vegetais, catálise para processos seletivos e química fina através de transformações catalíticas de alcinos, desenvolvimento de catalisadores de ruténio e novos catalisadores organometálicos ricos em carbono.

O prémio será entregue durante o XXVII Encontro Nacional da SPQ que se realizará em Braga de 14 a 16 de julho de 2021. A lista de todos os vencedores do Prémio Luso-Francês pode ser consultada em spq.pt/premios/luso-frances/lista.

>

Bruno Machado
brunofm@fe.up.pt

Prémio Europeu da Química Sustentável 2021 Atribuído a James Clark

O Prémio Europeu de Química Sustentável, atualmente concedido pela Divisão da Química Verde e Sustentável a cientistas de excelência nesta vertente, tem como principal objetivo impulsionar esta área da Química. Pretende-se dar uma maior visibilidade ao esforço de cientistas europeus para a implementação da Química Verde no campo industrial e ser um motor para melhorar a inovação global e competitividade. Este prémio é bienal e anteriormente era proposto pela Divisão da Química Verde e Sustentável (*Division of Green and Sustainable Chemistry*) em conjunto com a Divisão da Química e

Ambiente (*Division of Chemistry and Environment*) da Sociedade de Química Europeia (*European Chemical Society*, EuChemS). A partir do presente ano é proposto apenas pela Divisão da Química Verde e Sustentável.

Em 2021, será o Professor James Clark, do Centro de Excelência de Química Verde da Universidade de York, Reino Unido, o cientista agraciado com o Prémio Europeu da Química Sustentável 2021 (ESCA 2021). Este prémio reconhece a excelência do contributo prestado por James Clark para a comercialização da investigação fundamental em química verde, o seu notável papel para o reconhecimento desta área como uma área distinta da química e ainda para a criação de uma comunidade científica global de química verde.

O vencedor do prémio ESCA 2021 será orador na 5.^a conferência da Divisão de Química Verde e Sustentável da EuChemS (5EUGSC), que este ano decorrerá de 26 a 29 de setembro, como conferência virtual devido à atual situação pandémica que se vive a nível mundial (Seugsc.org).

A Presidente da Divisão, Ana Aguiar-Ricardo, agradece a valiosa contribuição dos membros do Júri do Prémio ESCA.



>
Ana Aguiar-Ricardo
 p19@fct.unl.pt

Timothy Noël Vence o Prémio IUPAC-ThalesNano 2020 para Química de Fluxo

O prémio IUPAC-ThalesNano 2020 para Química de Fluxo foi concedido ao Professor Timothy Noël do Instituto Van't Hoff de Ciências Moleculares da Universidade de Amsterdão. O prémio homenageia contribuições notáveis no campo da química de fluxo, microfluídica, microfabricação e engenharia de microssistemas.

Este prémio, estabelecido pela empresa de tecnologia



húngara ThalesNano e concedido por um júri internacional sob os auspícios da IUPAC, visa reconhecer o papel fundamental que a Química de Fluxo desempenha na melhoria dos processos químicos.

O professor Timothy Noël é um dos líderes no campo da Química de Fluxo e, na última década, produziu contribuições científicas criativas na interface entre a Química e a Engenharia Química, sendo pioneiro em novas estratégias e tecnologias catalíticas de fluxo contínuo em síntese orgânica. Estas ferramentas encontraram uma

implementação significativa na indústria farmacêutica, superando vários desafios sintéticos.

O prémio deveria ser entregue durante o Congresso de Química de Fluxo 2021 agendado para abril em Boston (EUA), mas foi recentemente adiado devido à pandemia de COVID-19.

>

Bruno Machado

brunofm@fe.up.pt

Mulheres Distintas em Química ou Engenharia Química IUPAC 2021



No dia 11 de fevereiro de 2021, por ocasião do Dia Internacional das Mulheres e Raparigas na Ciência, a IUPAC anunciou a lista de 12 vencedoras do “Mulheres Distintas em Química ou Engenharia Química IUPAC 2021” (*IUPAC 2021 Distinguished Women in Chemistry or Chemical Engineering*). Iniciada em 2011 por ocasião do Ano Internacional da Química, esta distinção tem decorrido em cada Assembleia Geral bienal da IUPAC e Congresso Mundial de Química.

O seu objetivo é reconhecer e promover o trabalho de mulheres Químicas ou Engenheiras Químicas em todo o mundo. Os prémios serão entregues às 12 vencedoras durante o Congresso Mundial de Química da IUPAC, que se realizará em agosto de 2021.

A seleção das 12 premiadas teve como base a excelência em investigação básica ou aplicada, realizações notáveis no ensino ou educação, ou demonstração de liderança ou excelência nas ciências químicas.

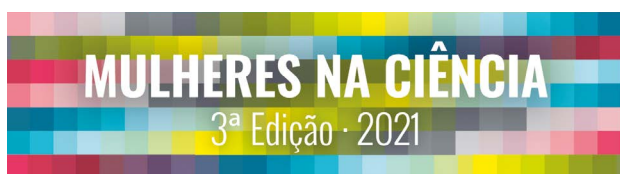
A lista contendo todas as vencedoras deste prémio desde 2011 pode ser consultada em iupac.org/wp-content/uploads/2021/02/Recipients-IUPAC-Distinguished-Women-in-Chemistry-or-Chemical-Engineering_20210208.pdf.

>

Bruno Machado

brunofm@fe.up.pt

Mulheres na Ciência 2021



Mulheres na Ciência, 3.ª edição, 2021. ISBN: 978-989-54649-5-1.
Ciência Viva - Agência Nacional para a Cultura Científica e Tecnológica

O livro "Mulheres na Ciência" (3.ª edição), uma iniciativa da Ciência Viva, foi lançado no passado dia 8 de março, Dia Internacional da Mulher. Com retratos de cientistas de diferentes gerações e áreas do conhecimento (Ambiente e Alterações Globais, Arquitetura, Bioengenharia e Biotecnologia, Ciência Política e Direito, Ciências Agrárias e Florestais, Ciências Biológicas, Ciências da Educação, Ciências da Saúde, Ciências da Terra, Ciências Sociais e Humanas, Economia e Gestão, Engenharias, Filosofia, Física, História, Matemática, Química e Bioquímica),

neste ano de 2021, e em plena pandemia, Mulheres na Ciência distingue 101 investigadoras. Esta iniciativa teve como objetivo dar continuidade às homenagens a mulheres cientistas portuguesas iniciadas em 2016. Das 101 mulheres fotografadas por Clara Azevedo, José Carlos Carvalho, Luís Filipe Catarino e Rita Carmo, 11 têm ligações às áreas da química e afins, mas todas exibem uma forte paixão pela sua “Ciência”, uma dedicação extrema e constituem assim uma grande motivação e uma fonte de inspiração para outras jovens investigadoras seguirem esta vocação.

Com o entusiasmo que lhe é característico poderá rever a intervenção de Rosalia Vargas, Presidente da Ciência Viva, assim como o programa completo do evento em cienciaviva.pt/divulgacao-cientifica/mulheresnaciencia/dia-internacional-da-mulher.

>

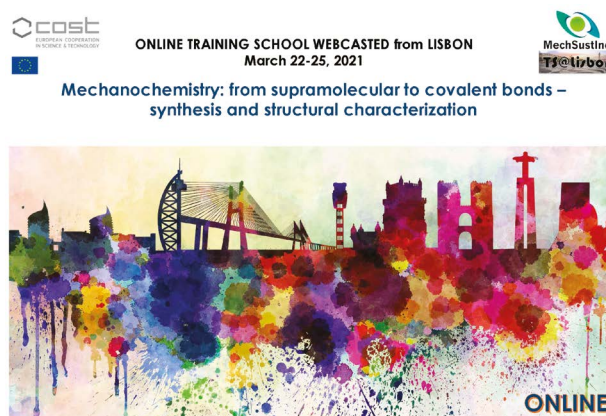
Maria José Lourenço

mjlourenco@ciencias.ulisboa.pt

Training School on Mechanochemistry: From Supramolecular to Covalent Bonds

De 22 a 25 de março de 2021 decorreu em formato *online*, com difusão a partir de Lisboa, a ação de formação avançada “*Training school on Mechanochemistry: From supramolecular to covalent bonds*”, realizada no âmbito da ação COST *Mechanochemistry for Sustainable Industry* (Mech@SustInd, CA18112, mechsustind.eu), na qual participaram alunos e professores de 15 nacionalidades diferentes. Esta ação COST, da qual fazem parte Teresa Duarte (CQE, IST/UL), Vânia André (CQE, IST/UL), Clara Gomes (LAQV-REQUIMTE, FCT NOVA) (organizadoras desta escola) e Maria de Fátima Minas da Piedade (CQE, IST/UL) e Mafalda Sarraguça (LAQV-REQUIMTE, FF/UP), tem como objetivo harmonizar a investigação fundamental e aplicada com a inovação tecnológica e as necessidades de uma indústria mais sustentável. Este processo envolve não só a formação de uma nova geração de especialistas nesta área, mas também a promoção do estudo da mecanoquímica e o incentivo à sua utilização em processos de produção, catalisando novas estratégias para a indústria química europeia, culminando a longo prazo no desenvolvimento de uma economia mais verde e mais competitiva.

Esta escola contou com a participação de docentes e investigadores de diferentes centros de investigação nacionais e internacionais, lecionando nas suas áreas de especialização: CQE, IST/UL e FCUL: Ana Paula Ribeiro, Auguste Fernandes, Ermelinda Maçôas, Her-



mínio Diogo, Maria de Fátima Minas da Piedade, Maria João Ferreira, Luísa Martins; iBB, IST/UL: Vasco D. B. Bonifácio; CICECO, UA: Luís Mafra; LAQV-REQUIMTE, FF/UP: Mafalda Sarraguça; CQC, UC: Marta Piñeiro; *Novosibirsk State University*, Rússia: Elena Boldyreva; *McGill University*, Canadá: Tomislav Friscic; *University of Bologna*, Itália: Fabrizia Grepioni; *University of Copenhagen*, Dinamarca: Inês C. B. Martins; *University of Montpellier*, França: Evelina Colacino.

Para além das aulas teóricas, disponibilizaram-se vários módulos com demonstrações práticas sobre diferentes aplicações da mecanoquímica na síntese de pequenas moléculas e materiais avançados. Foram ainda apresentadas diferentes abordagens do uso da mecanoquímica, desde a moagem manual à utilização de diferentes tipos de moinhos, complementadas com as principais técnicas de caracterização estrutural (Difração de raios-X em pó e monocristal, ATR-FTIR, Raman, TGA-DSC e ssNMR).

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

Importância da Ciência Aberta para a *Chemistry Europe*

A partilha de dados permite que os investigadores façam melhor ciência. A ciência aberta defende o acesso partilhado a dados de alta qualidade, reprodutibilidade, publicação de resultados positivos, bem como negativos, e um licenciamento claro e objetivo que descreva como os dados partilhados podem ser usados. A melhoria quer das infraestruturas técnicas quer do *software* têm o potencial de tornar as colaborações mais eficazes e, em última análise, acelerar a ciência, tornando-a mais impactante. No

entanto, os avanços em áreas como aprendizagem de máquina (*machine learning*) e inteligência artificial só podem ser totalmente explorados se os investigadores tiverem acesso aos dados de alta qualidade que a comunidade científica gera (baseada na declaração de Matthew Todd, University College London U.K., sobre a importância da ciência aberta na Química Europeia).

Comprometida em promover o acesso aberto e os dados abertos, a *Chemistry Europe* disponibiliza uma seleção de artigos publicados no seu portfolio sobre estes temas. Estes podem ser acedidos em [chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/toc/10.1002/\(ISSN\)9999-0001.Open-Data](https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/toc/10.1002/(ISSN)9999-0001.Open-Data).

O 1.º Simpósio Virtual organizado pela *ChemistryOpen* intitulado *Open Data and Open-Source Research* encontra-se disponível para visualização em youtube.com/watch?v=ySRT-n_S0hM.

>

Bruno Machadobrunofm@fe.up.pt

Matérias-primas Críticas: Novas Medidas da UE para Baterias Sustentáveis

A 10 de dezembro de 2020 a Comissão Europeia anunciou num comunicado de imprensa a sua proposta para modernizar a legislação da União Europeia sobre baterias. Com novos requisitos obrigatórios para todas as baterias colocadas no mercado da UE, a Comissão Europeia gostaria de estabelecer uma cadeia de valor de baterias sustentáveis, restringindo o uso de substâncias perigosas. Além disso, essas novas medidas também se concentrarão em metas de reciclagem para evitar o desperdício de matérias-primas críticas usadas nas baterias. Estas medidas ambientais mais rígidas fazem parte das ações anunciadas no novo Plano de Ação para a Economia Circular, um dos principais alicerces do Pacto Ecológico Europeu. A redução do impacto ambiental das baterias é um passo em direção à neutralidade climática em 2050. Pode ler o comunicado de imprensa da Comissão Europeia em ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/pt/ip_20_2312.



© Copyright: Comissão Europeia 2020

>

Bruno Machadobrunofm@fe.up.pt

A Química: O Primeiro Século na Universidade de Coimbra e o Progresso desta Ciência

Sobre o Livro

A matriz reflexiva deste escrito é constituída pela evolução da Química na Universidade de Coimbra e nos países cientificamente mais avançados no decurso do primeiro século desta ciência, no que respeita à história das ideias e às condições necessárias para o seu progresso, tais como as técnicas laboratoriais, o interesse social e a sua capacidade de associação. O estudo comparativo do desenvolvimento da Química no nosso País e o crescimento explosivo da ciência no plano internacional não deixa também de ser objeto de análise crítica na economia da obra. O declínio da Universidade ao tempo da criação da cadeira de Química e a fase pré-científica desta disciplina são apresentadas como introdução necessária à avaliação científica do período em apreço.



> José Simões Redinha



Imprensa da Universidade de Coimbra
 ISBN: 978-989-26-1874-6
 eISBN: 978-989-26-1875-3
 DOI: 10.14195/978-989-26-1875-3

Sobre o Autor

José Simões Redinha é Professor Catedrático Jubilado da Universidade de Coimbra (UC), no Departamento de Química da FCTUC. Fez o seu percurso académico na Universidade de Coimbra e doutorou-se em 1958 na Universidade de Londres enquanto investigador no *Imperial College of Science and Technology*, na especialidade de Termodinâmica Química. Entre 1963 e 1966 contribuiu para o estabelecimento da Química na Universidade de Lourenço Marques, em Moçambique, cujos laboratórios equipou e dirigiu. Nos anos de 1972 a 1974, foi responsável pela introdução e arranque dos cursos de licenciatura em Engenharia na Faculdade de Ciências e Tecnologia da UC, na qualidade de seu primeiro Diretor, tendo ocupado idêntico lugar na Faculdade de Ciências, que a antecedeu. De 1980 a 1990, desempenhou, diversas vezes, o cargo de Presidente do Departamento de Química e da sua Comissão Científica. Executou ainda funções na EURATOM e na EUROCHEM, tendo sido responsável pela criação e direção de estruturas formais para ligação da Universidade de Coimbra à indústria. É autor de mais de uma centena de publicações de ciência fundamental, ciência aplicada e didática, a maior parte das quais foram publicadas em revistas internacionais. É membro da Academia das Ciências de Lisboa desde 1979 e de várias associações científicas. A sua área de investigação científica tem sido direcionada para o estudo das interações moleculares e iónicas, principalmente em soluções aquosas, e os seus efeitos energéticos, quer no domínio experimental, quer na interpretação teórica e físico-química.

Change is here

ChemPubSoc Europe has transformed into Chemistry Europe.



Our mission is

to evaluate, publish, disseminate and amplify the scientific excellence of chemistry researchers from around the globe in high-quality publications.

We represent 16 European chemical societies and support their members at every stage of their careers as they strive to solve the challenges that impact humankind. We value integrity, openness, diversity, cooperation and freedom of thought.

Chemistry Europe

- 16 chemical societies
- From 15 European countries
- Who co-own 16 scholarly journals
- And represent over 75,000 chemists
- With 109 Fellows recognized for excellence in chemistry
- 13 million downloads in 2019
- 9,800 articles published in 2019

www.chemistry-europe.org

Batteries & Supercaps

ChemBioChem

ChemCatChem

ChemElectroChem

ChemistryOpen

Chemistry-Methods

ChemistrySelect

ChemMedChem

ChemPhotoChem

ChemPhysChem

ChemPlusChem

ChemSusChem

ChemSystemsChem



European Chemical
Societies Publishing

published in partnership with

WILEY-VCH

Vasco Trigo

– Comunicar Ciência



>

Interação Química com

Maria José Lourenço

mjlourenco@ciencias.ulisboa.pt

Vasco Matos Trigo

vmtrigo@gmail.com

O Mundo atual é caracterizado como um sistema complexo e exigente onde a comunicação desempenha um papel fundamental. Mas como várias atividades, a comunicação também necessita de treino. E é crucial treinar para comunicar ciência a não especialistas e não desfocar mensagens. Uma mensagem emitida por um locutor não deve suscitar dúvidas ou confusão por quem a recebe. Onde está a informação relevante? Com um único objetivo de não perder o rigor e garantir que a mensagem é transmitida e apreendida de forma eficaz, cientistas de todas as áreas do conhecimento são estimulados a simplificar a sua mensagem e a interagir com públicos diversos. Sabia que quando se comunica ciência ao público em geral se aumentam as capacidades de comunicação nos domínios da especialidade? Sabia que organizar ideias, simplificar mensagens, conhecer audiências, interagir com os *media* e desenhar um estilo de apresentação oral e escrita são considerados grandes desafios científicos da atualidade? Num toque de cumplicidade para uma conversa diferente, onde o jornalista passa a entrevistado, a *Interação Química* aproximou-se de Vasco Trigo, autor e apresentador e o responsável pelo magazine semanal da RTP 2 “Com Ciência”, exibido entre 2010 e 2012. Ainda se lembra? Valerá a pena recordar no Arquivo da RTP os vários programas dedicados à celebração do Ano Internacional da Química em 2011.

Vasco Matos Trigo, com mais de 35 anos de carreira, é uma figura bem conhecida do público em geral e muito em especial da grande maioria dos investigadores do nosso país. Locutor e realizador de programas na rádio, jornalista, repórter político, repórter parlamentar, editor de programas de informação, é considerado um dos maiores especialistas portugueses em Comunicação de Ciência. O seu domínio científico de atuação nas Ciências Sociais localiza-se nas Ciências

da Comunicação e da Educação e ainda possui competências de Engenharia e Tecnologia (talvez não saiba, mas entre 1976 e 1985, Vasco Trigo estudou Engenharia Eletrotécnica na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto). No entanto, é jornalista desde 1984. Começou na Rádio Renascença, exerceu também na imprensa escrita e foi para a RTP em 1988 onde apresentou e coordenou vários noticiários (24 Horas, Telejornal, Jornal de Sábado, Jornal de Domingo, Jornal 2,

RTPN, RTP Informação) e vários programas (Sinais do Tempo, Zoom, Parlamento, 2001, 2010, Com Ciência). É moderador de debates, mesas-redondas, seminários, congressos e repórter de Ciência e Tecnologia desde 1996. Tem a licenciatura em Estatística e Gestão da Informação pela Universidade Nova de Lisboa e o MBA em Audiovisual & Multimedia pelo Institut Saint Louis de Bruxelas. Tem mais de uma dezena de anos de docência com experiência em unidades curriculares de 1.º e 2.º Ciclos (Licenciatura em Ciências da Comunicação e Mestrado em Jornalismo), a saber, Teorias e Políticas da Cultura e da Ciência, Atelier de Jornalismo Cultural e Científico, Cultura e Media, Contemporaneidade e Produção Cultural.

Gostava que caracterizasse o seu percurso académico e profissional.

Eu nasci no Porto. Quando era miúdo era para ser engenheiro eletrotécnico. E fui quase, cheguei ao 5.º ano, na altura a licenciatura era de 5 anos. Mas em paralelo com a faculdade comecei a fazer rádio, na Rádio Renascença, e entusiasmei-me com a comunicação social. Em 1985 mudei-me para Lisboa para evoluir no jornalismo e em 1988 passei da rádio para a televisão. Fazia então jornalismo na área política. Em 1996 fui desafiado para fazer um programa de televisão sobre ciência e tecnologia e deu-se uma viragem na carreira profissional. Daí para cá dediquei-me à comunicação de ciência. Licenciiei-me em Estatística e Gestão de Informação e fiz um MBA em Audiovisual e Multimédia. O meu interesse no processo de comunicação de ciência conduziu-me a investigações ao nível de doutoramento, que continuo a desenvolver, com foco na crescente adesão dos cientistas ao processo de comunicação para públicos leigos. Em paralelo, dei aulas no ensino superior e frequentemente oriento ações de formação em comunicação de ciência.

De que área estamos a falar?

Genericamente, estamos a falar de comunicação, de partilha de informação e de conhecimento. Como jornalista, o destinatário do que faço é o público em geral. O jornalista é o mediador entre quem tem perguntas e quem tem as respostas para essas perguntas. Especificamente, estamos a falar de comunicação de ciência, de tecnologia, de conhecimento, de inovação.

Quando decidiu seguir esta área? Porquê?

Não me arrependo de ter optado por esta profissão, mas não vou dizer que sempre quis ser jornalista, porque

não é verdade. Sempre me interessei por tecnologia e inovação. Lembro-me, por exemplo, de no início da década de 1980, ainda na rádio, ter sido algo pioneiro com rubricas sobre informática e jogos de computadores. Era o tempo dos *Spectrum*, muita gente não se lembra ou não viveu nesse tempo. Eu transmitia programas informáticos via rádio, coisa que suscitou muitas dúvidas até entre engenheiros, mas que funcionou. A especialização em comunicação de ciência para públicos leigos, como disse, começou em 1996. Recordo que nessa altura se abriu uma nova era para a ciência em Portugal, em grande parte graças a uma figura incontornável que foi José Mariano Gago. A comunidade científica deu um salto em quantidade e em qualidade. E era preciso que a sociedade em geral se apercebesse dessa mudança. Foi para isso que tentei contribuir.

“

Comunicação de ciência, como eu a entendo, tem por destinatário o público leigo e é feita por jornalistas, por cientistas e por outros agentes que consigam traduzir em linguagem acessível os temas da ciência e os resultados da investigação.

Há algum momento/passagem que gostaria de destacar nos seus trabalhos? Qual? Quais?

Um episódio que eu nunca esquecerei, embora possa parecer banal, foi uma abordagem na rua por um jovem que me reconheceu e me disse: “*Você é a pessoa mais importante na minha vida, a seguir aos meus pais, porque foi por ver os seus programas na RTP que decidi tirar o curso de Física que estou agora a concluir*”. No dia a dia, cumprindo as nossas rotinas, nem sempre estamos conscientes do impacto que o nosso trabalho tem na vida dos outros, mas episódios como este fazem-nos refletir e aumentam a nossa responsabilidade.

“

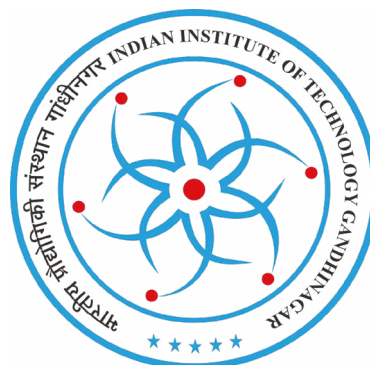
Gostava que a sociedade entendesse que a evolução assenta na ciência e no conhecimento.

Comunicação de Ciência/Jornalismo em Portugal ou no estrangeiro? Como aconteceu consigo?

Vale a pena fazer aqui uma clarificação de conceitos. Eu gosto de distinguir entre jornalismo de ciência, comunicação de ciência e comunicação científica. Jornalismo de ciência é feito por jornalistas e além de comunicação de ciência inclui outras vertentes, como por exemplo política de ciência, economia de ciência ou sociologia da ciência. Tem por destinatário o público em geral. Comunicação de ciência, como eu a entendo, tem por destinatário o público leigo e é feita por jornalistas, por cientistas e por outros agentes que consigam traduzir em linguagem acessível os temas da ciência e os resultados da investigação. Comunicação científica é como eu designo a comunicação que os cientistas fazem para os seus pares, para os seus estudantes e para públicos especializados. Eu desenvolvi a minha carreira em Portugal, mas sempre olhando para o estrangeiro, porque o jornalismo de ciência já se fazia noutros países há mais tempo. Estou a pensar em Inglaterra, em França, na Alemanha ou nos Estados Unidos, por exemplo. Faço parte de várias redes internacionais de comunicação de ciência e de jornalistas de ciência.

Qual é o país com que tem mais colaboração?

Tenho desenvolvido algum trabalho na Índia, em particular no IITGN, o *Indian Institute of Technology* de Gandhinagar. Conduzi ações de formação e produzi alguns conteúdos. Em 2019 e em 2020 desloquei-me lá e mantenho essa ligação, agora remotamente, pelas circunstâncias que vivemos. Apesar de ser uma realidade diferente, há muito de comum, porque afinal a ciência não conhece fronteiras. O convite para colaborar com o IITGN resulta de um compromisso com a promoção da excelência não só na Ciência e Tecnologia, mas também nas Humanidades e Ciências Sociais. Para atingir o objetivo de formar técnicos com uma visão humanística, com capacidade e competências para intervir na sociedade, esta instituição convida regularmente especialistas e investigadores estrangeiros.



Indian Institute of
Technology Gandhinagar.
iitgn.ac.in

Quais os aspetos mais relevantes e que benefícios para a sociedade é que o seu trabalho nesta área nos pode trazer?

Vou-lhe responder com uma curta frase que assumi como o fundamento da minha atividade. O meu objetivo é contribuir para elevar o nível de cultura científica da sociedade, por forma a que os indivíduos possam melhor exercer os seus direitos de cidadania.

Jornalistas para quê, na Sociedade da Informação?

Vasco Matos Trigo
Radiotelevisão Portuguesa-SPT
vtrigo@rtpt.pt

Resumo

Na Sociedade da Informação continua a haver lugar para o Jornalista? Partindo de uma tradicional análise SWOT, este texto procura estabelecer referenciais para um novo posicionamento do Jornalista enquanto actor social. No fundo, trata-se de discutir a relação do Jornalismo e Sociedade. Há quem considere a comunicação uma das questões centrais do século XXI, na sequência da realização já conseguida da aldeia global. Ora, um dos aspectos dessa questão é a medição das consequências para a Humanidade. Neste capítulo tentamos contribuir para este tipo de avaliação, concretamente para o Jornalista. Para atingir esse objetivo parece fundamental esclarecer a confusão habitual entre Jornalismo e Informação. Porque, se no universo digital tudo pode ser considerado informação, nem tudo – relativamente muito pouco, aliás – é Jornalismo.

Palavras-chave: jornalismo; informação; aldeia global.

“Quando sopram ventos de mudança,
podes construir abrigos ou moinhos.”
Ditado dinamarquês

Vasco Matos Trigo, “Jornalistas para quê, na Sociedade da Informação” in *Sociedade de Informação - O Percurso Português*, de José Dias Coelho, Lisboa: Edições Sílabo, 2007, págs. 556-565. ISBN: 9789726184621.

Todos os anos são proclamados pelas Nações Unidas “Os Anos Internacionais de...”. Como é que a Sociedade celebra estes temas? Há comunicação/divulgação suficiente?

Sou relativamente cético sobre a eficácia dessas iniciativas, embora reconheça que constituem oportunidades para dar alguma visibilidade, nomeadamente através de eventos e atividades. Mas será que fica alguma coisa, no fim do ano? Não estou a dizer que não deva haver os “Anos Internacionais de ...”, mas o que eu gostava, se calhar com alguma utopia à mistura, era que a ciência

estivesse mais presente no quotidiano, nas notícias, nas conversas de café, nos processos de decisão, na economia. Gostava que a sociedade entendesse que a evolução assenta na ciência e no conhecimento.

Fale-nos de um momento importante na sua carreira.

A atribuição do Prémio “Seeds of Science - Área de Comunicação”, em 2010, foi muito agradável. E foi uma surpresa, porque não resultou de uma candidatura. Sinceramente, nunca corri atrás de prémios. Mas não os desprezo, claro. Eu sempre me esforcei por dar o meu melhor e não escondo que é agradável ser distinguido, é uma prova de que o nosso esforço é apreciado e reconhecido. Fundamentalmente, aumentou a minha responsabilidade e da minha equipa. O prémio foi atribuído pelo Jornal Ciência Hoje, um jornal digital que, entretanto, foi descontinuado em 2015 por falta de apoios.

Quais têm sido os principais desafios?

O principal desafio para um jornalista de ciência em qualquer órgão de comunicação é a disputa por espaço. A ciência não é prioritária. Além disso, a produção de conteúdos noticiosos interessantes sobre ciência é dispendiosa em termos de tempo e até de meios, o que conflitua com a pressão para a produtividade do jornalista. Este é um desafio interno. A nível externo, felizmente, nunca fui confrontado com dificuldades no contacto com os investigadores e com as instituições para recolha de informação. Um desafio permanente é o de conciliar o tempo da comunicação, caracterizado pelo imediatismo, com o tempo da ciência, necessariamente mais longo.

“
Vejo com enorme satisfação personalidades que hoje se destacam e lideram projetos e instituições e cujos primeiros passos eu acompanhei há 25 anos.

Fale-nos da sua experiência com o Programa “Com Ciência”.

O “Com Ciência” existiu entre 2010 e 2012, mas foi a sequência lógica do “2001” entre 1996 e 2000 e do

“2010” entre 2001 e 2008. Nós tivemos o privilégio de testemunhar uma mudança profunda no que se pode chamar o ecossistema da investigação científica em Portugal. Basta comparar a situação na década de 1990 com o panorama atual, quer na dimensão quer na qualidade da comunidade de cientistas, quer ainda nas próprias instituições de investigação. Estamos num patamar notoriamente superior. E eu assisti e acho que de certa forma pude dar um pequeno contributo. Vejo com enorme satisfação personalidades que hoje se destacam e lideram projetos e instituições e cujos primeiros passos eu acompanhei há 25 anos.



Magazine semanal, exibido entre 2010 e 2012, apresentado por Vasco Matos Trigo, dedicado a temas de ciência, tecnologia e inovação. A rever em arquivos.rtp.pt/programas/com-ciencia.

Que análise faz sobre a cultura científica em Portugal?

A cultura científica no nosso país é reduzida, para não dizer insignificante. E por isso há um terreno fértil para desconfianças e teorias da conspiração. Felizmente é crescente a sensibilidade, o interesse e mesmo o empenho dos investigadores no processo de comunicação de ciência para os públicos leigos. Mas há muito a fazer. As tecnologias digitais, os novos *media* e as redes sociais vieram abrir oportunidades para ultrapassar algumas dificuldades no acesso à comunicação social tradicional. Mas não basta divulgar os resultados do trabalho dos cientistas. É preciso ultrapassar o caráter meramente utilitarista que por vezes domina a abordagem da ciência e que limita, por exemplo, o acesso a financiamentos. Claro que é importante que um cientista consiga responder à pergunta “Para que serve a sua investigação?”, mas é preciso em paralelo valorizar a investigação básica ou fundamental. É mais difícil, claro, mas tem de ser feito. E explicar o método científico.

Quem deve falar sobre a COVID-19 ou outro tema nos media?

Quem tem de falar são os políticos, os decisores, que devem explicar que as decisões têm por base o co-

nhcimento científico disponível em cada momento. Por isso, quem também tem de subir ao palco são os especialistas, mas sem inundarem o espaço, por uma questão de preservação da imagem. E devem cingir-se à sua área de especialização. A sociedade e os decisores pedem ou até exigem aos cientistas que forneçam informação que permita fundamentar decisões e regular comportamentos. Porém, a novidade do vírus e das suas variantes traz consigo uma carga acrescida de incerteza, o que dificulta a função de aconselhamento dos cientistas. Por outro lado, e ainda que muita decisão política tenha sido tomada invocando as informações providas pela ciência, será que essas informações foram bem interpretadas pelos decisores? E será que a população em geral interpretou bem as recomendações? É que apesar de a ciência estar acessível a muitas pessoas, nem todas conseguem entender. Estudos na área da psicologia mostram que demasiada informação para públicos leigos pode levar a um excesso de autoconfiança e as pessoas podem convencer-se de que sabem mais do que sabem na realidade. É preciso comunicar os processos, o método científico e a incerteza que lhe está associada. É a credibilidade dos cientistas e da ciência que está em causa, se hoje anunciarmos uma verdade absoluta e dois dias depois viermos dizer o contrário. Isto está a passar-se com as vacinas, por exemplo.

O que é que já aprendemos com esta pandemia?

Já fomos confrontados com as nossas limitações, mas também com a nossa capacidade de enfrentar desafios. Penso que aprendemos que a ciência pode ajudar a resolver os problemas e os desafios, se tiver os meios necessários. Espero que tenhamos compreendido que ninguém faz milagres, e que todos temos responsabilidades específicas na procura de soluções para problemas que nos afetam a todos.

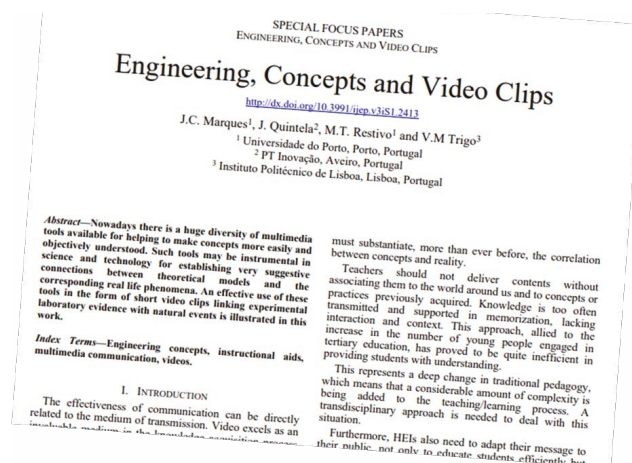
“**Se calhar podia montar-se um projeto “Tudo é Química”, à semelhança do “Isto é Matemática” que abrange a televisão, internet, literatura e espetáculos ao vivo, ou do “Tudo é Economia” que passou na RTP. É uma sugestão.**”

Como é que a Ciência em Portugal deveria ter um papel de destaque na atual pandemia?

Considero que a ciência tem tido destaque, nas reuniões de especialistas e na presença de cientistas nos *media*. Mas por vezes há demasiado “folclore” e pouca substância. Acho que se podia dar mais visibilidade ao contributo de cientistas e instituições portuguesas no combate à pandemia. Alguma coisa tem sido feita, mas pode ser reforçada.

A Química tem um papel fundamental na Sociedade, mas frequentemente é acusada de efeitos nefastos, ou seja, dizem que isso tem Químicos! Na sua opinião como se deve reverter esta ideia para repor a verdade dos factos pois afinal tudo é Química?

Se calhar podia montar-se um projeto “Tudo é Química”, à semelhança do “Isto é Matemática” que abrange a televisão, internet, literatura e espetáculos ao vivo, ou do “Tudo é Economia” que passou na RTP. É uma sugestão.



J. C. Marques, J. Quintela, M. T. Restivo, V. M. Trigo, *International Journal of Engineering Pedagogy, Special Issue, TaT'2012, Talking about Teaching 2012, 2013, 3, 22-25.*

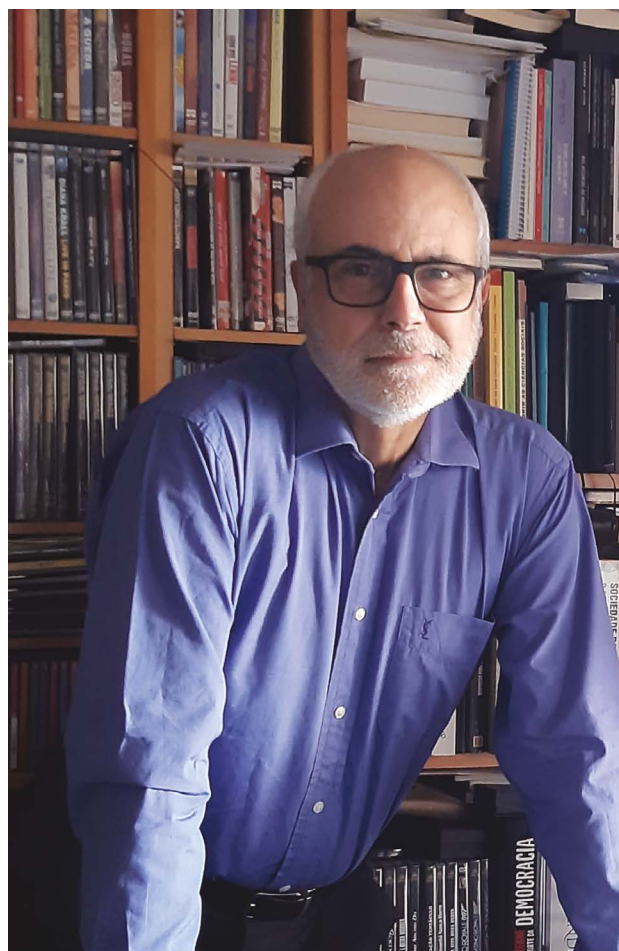
Indique-me um livro, uma música e um filme/teatro da sua preferência

“La science est le défi du XXI siècle”, foi escrito em 2009 por Claude Allègre, um geoquímico e ex-ministro da educação. No livro, este membro da Academia das Ciências de França, dos Estados Unidos e da Índia, e também da *Royal Society*, propõe que a resposta a questões como as catástrofes ecológicas, as crises financeiras e económicas e o restabelecimento da harmonia entre os homens e entre os homens e a natureza seja encontrada à luz da ciência e da técnica, o que ele considera “os motores essenciais

da História”. Em termos musicais sou muito eclético. Ouço regularmente Bach, os concertos para violino e a obra para órgão. Vivaldi é outro barroco de que gosto. Nos clássicos destacaria Mozart. Mas também me toca o “Porto Sentido” do Rui Veloso, que me faz regressar aos tempos de juventude. Nos filmes, vou destacar o “Voando sobre um ninho de cucos” do Milos Forman, que valeu o primeiro óscar ao Jack Nicholson e que nos faz refletir sobre quem são os verdadeiros loucos.

“

Para mim, um jornalista não é só um técnico de comunicação. Mas ele deve fundamentalmente ter as competências para detetar o que é importante e usar as técnicas de comunicação para tornar interessante o que é importante.



Na sua relação com a gastronomia o equilíbrio está mais deslocado para o lado dos sólidos ou dos líquidos? Qual o melhor prato que comeu em toda a sua vida?

Aprecio boa comida e gosto de experimentar a diversidade. Gosto de carne e de peixe, mas também não rejeito comida vegetariana bem cozinhada, como se faz em algumas regiões da Índia. No vinho, prefiro o tinto, principalmente do Douro. Não consigo escolher um melhor prato, mas seria talvez entre bacalhau à Braga, posta mirandesa, cataplana de marisco ou robalo na brasa.

Qual a melhor viagem do mundo?

Na juventude andei durante um mês à boleia pela Europa. Aprendi muito. Mais tarde, a primeira ida à Índia.

Como diminuí a pressão no trabalho? Há hobby?

Brincar à agricultura é relaxante, mas também é bom deambular sem destino pelas ruas da cidade. Se estiver mau tempo, ler livros é sempre bom.

Qual é o seu lema de vida/lema de vida profissional? Missão para a sociedade?

Para mim, um jornalista não é só um técnico de comunicação. Mas ele deve fundamentalmente ter as competências para detetar o que é importante e usar as técnicas de comunicação para tornar interessante o que é importante.

Se a sua vida desse um filme quem gostaria que fosse o realizador?

Não dará, seguramente. Mas gosto das abordagens do Leonel Vieira, para escolher um realizador português.

Por agora a nossa interação terminou. À data de hoje sabemos mais e o conhecimento adquirido permite que enfrentemos o futuro com segurança convictos que a Química e as suas áreas afins podem resolver problemas da Humanidade. Vasco, foi um gosto a sua entrevista e muito obrigada pelo tempo disponibilizado.

(realizado em abril 2021)

Artemisia annua: Uma Solução Terapêutica Contra a COVID-19

Atualmente, não existe um tratamento específico contra o coronavírus SARS-CoV-2. A esperança recai naturalmente em vacinas que possibilitem a obtenção da imunidade de grupo. Contudo, a longo prazo, talvez seja necessário procurar alternativas terapêuticas. A partir deste pressuposto, vários tratamentos à base de extratos fitoquímicos usados na Medicina Tradicional Chinesa foram explorados para tratar infecções por coronavírus. Estudos iniciais mostraram que o extrato alcoólico de absinto doce (*Artemisia annua*) foi o segundo medicamento fitoterapêutico mais potente usado no surto de SARS-CoV de 2005, cujas propriedades biológicas se devem principalmente à artemisinina.

A artemisinina é uma lactona sesquiterpênica descoberta pela farmacologista chinesa Tu Youyou, permitindo-lhe arrecadar em 2015 o Prêmio Nobel de Fisiologia ou Medicina. Em termos químicos, a particularidade estrutural da artemisinina que lhe confere a respetiva atividade é o endoperóxido, incorporada no anel de 1,2,4-trioxano, que está envolvida no mecanismo de ação, ainda não totalmente elucidado. No entanto, os estudos realizados indicam que o anel de endoperóxido sofre clivagem oxidativa na presença de ferro(II) presente em hemeproteínas, originando radicais livres altamente reativos que danificam proteínas e material genético do parasita, resultando na respetiva morte, daí o seu uso no tratamento da malária.

Investigadores do Instituto Max Planck de Coloides e Interfaces, de Potsdam, Alemanha, avaliaram o potencial dos extratos vegetais de *Artemisia annua* e derivados de artemisinina contra o novo coronavírus SARS-CoV-2 e descobriram que os extratos fitoquímicos



Crédito: Kerry Gilmore

evidenciavam atividade antiviral após serem extraídos com etanol puro ou água destilada, e que a atividade aumenta consideravelmente quando os extratos obtidos são combinados com alcaloides, sobretudo com a cafeína. Apesar dos resultados relativos aos ensaios *in vitro* serem promissores, a próxima etapa passará por testar a atividade dos extratos vegetais de *Artemisia annua* no tratamento da COVID-19 em humanos, com o uso de chás e cafés, no centro médico acadêmico da Universidade de Kentucky, de forma a determinar se a *Artemisia annua* pode ser efetivamente usada contra o SARS-CoV-2.

>

José R. A. Coelho

pg42590@alunos.uminho.pt

Fontes

Artemisia annua to be tested against Coronavirus, mpg.de/14663263/artemisia-annua-corona-virus (acedido em 20/02/2021).

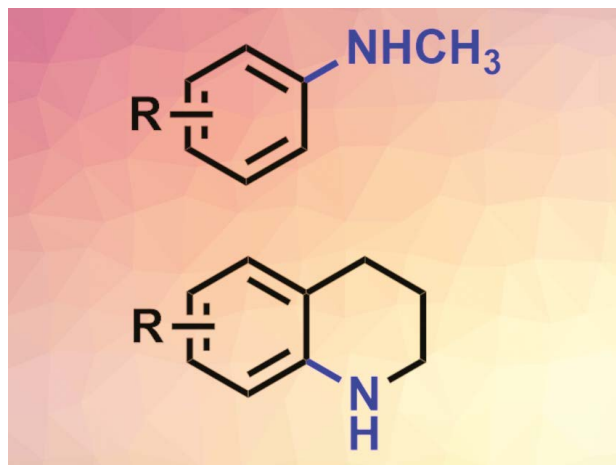
K. Gilmore, Y. Zhou, S. Ramirez, L. V. Pham, U. Fahnøe, S. Feng, A. Offergaard, J. Trimpert, J. Bukh, K. Osterrieder, J. M. Gottwein, P. H. Seeberger, *BioRxiv*. DOI: 10.1101/2020.10.05.326637.

Síntese de N-Alquilanilinas Através de Aminação C-H Aromática com Ferro

As aminas aromáticas são particularmente importantes devido à sua utilização em produtos farmacêuticos, agroquímicos, catalisadores ou corantes. A preparação destes compostos através de reações de aminação de arenos obriga à construção de ligações C(sp²)-N. Geralmente, as abordagens tradicionais para a aminação de arenos envolvem vários passos sintéticos e condições experimentais bastante exigentes.

Eric Falk e colaboradores, do Instituto Federal de Tecnologia de Zurique, na Suíça, desenvolveram uma metodologia mais simples para a aminação de arenos, usando sais de ferro(II) como catalisadores e derivados de hidroxilamina como agentes de aminação altamente eletrofílicos, possibilitando a síntese de *N*-metilanilinas e tetra-hidroquinolinas. Esta equipa de investigação estabeleceu que o catalisador ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) e o reagente de aminação $[\text{NsO}-\text{NH}_2-\text{CH}_3]^+\text{OTf}^-$ (Ns = nosilo, OTf = triflato), utilizando 1,1,1,3,3,3-hexafluoroisopropanol (HFIP) como solvente, permitem a eficaz *N*-metilaminação do benzeno. A reação pode ser realizada ao ar, a 40 °C, pelo que é operacionalmente simples, não requerendo equipamento especializado. Usando esta abordagem foi possível transformar arenos neutros e ricos em eletrões nos correspondentes produtos com o grupo *N*-metilamina com rendimentos moderados a elevados (44-89%). Além disso, as condições de reação permitem a preparação de tetra-hidroquinolinas através da reação intramolecular de arenos com um substituinte propílico, funcionalizado com o grupo $\text{N}(\text{OTs})\text{Boc}$ (Ts = tosilo, Boc = *tert*-butiloxicarbonilo), na presença de ácido trifluoroacético para promover *in situ* a desproteção do material de partida. Os derivados de tetra-hidroquinolina foram obtidos com rendimentos razoáveis (34-56%).

O processo descrito por Eric Falk e colaboradores permite a síntese de *N*-metilanilinas e tetra-hidroquinolinas a partir de arenos simples, promovidas por sais de ferro(II), sem necessidade de controlo de exposição ao oxigénio do ar ou à humidade e facilmente realizadas em condições suaves.



Crédito: ChemistryViews

>

José R. A. Coelho

pg42590@alunos.uminho.pt

Fontes

Iron-Catalyzed Synthesis of *N*-Alkyl Anilines, chemistryviews.org/details/news/11288171/Iron-Catalyzed_Synthesis_of_N_Alkyl_Anilines (acedido em 22/02/2021).

E. Falk, V. C. M. Gasser, B. Morandi, *Org. Lett.* **2021**, 23, 1422-1426. DOI: 10.1021/acs.orglett.1c00099.

Espectroscopia de RMN Usada para Certificar Café



Crédito: ChemistryViews

O café é uma das bebidas mais consumidas no mundo. Entre cerca de 500 espécies de café, existem duas variedades com maior importância comercial: a *Coffea arabica* e a *Coffea canephora* var. Robusta, conhecidas como cafés arábica e robusta, respetivamente. O café arábica é considerado, geralmente, de qualidade superior em comparação com o robusta, tendo um preço superior. A adulteração do café arábica com o robusta, mais barato, pode ser difícil de detetar uma vez que os grãos são torrados e moídos. A deteção dessas adulterações é importante de modo a garantir a proteção do consumidor e a capacidade da indústria alimentar e de bebidas para obter produtos de alta qualidade. Assim, há necessidade de desenvolver soluções analíticas inovadoras que permitam garantir a autenticidade e qualidade das matérias-primas e de produtos alimentares.

Fabrice Berrué (Centro de Pesquisa de Desenvolvimento de Recursos Aquáticos e Culturais, Conselho

Nacional de Pesquisa do Canadá, Halifax) e colegas desenvolveram um método de ressonância magnética nuclear de próton (¹H-RMN) para diferenciar o café arábica puro do café robusta e determinar a percentagem de robusta nas misturas de café. A equipa de investigação obteve amostras de 292 cafés torrados e misturas representativas do café comercializado pela indústria e também prepararam misturas arábica/robusta com diferentes proporções em massa. Os investigadores extraíram as amostras de café moído usando metanol deuterado como solvente e obtiveram os espectros de RMN dos extratos.

A equipa quantificou doze constituintes diferentes do café, incluindo cafeína, lípidos, ácido nicotínico, ácido fórmico e ácido acético. O metanol revelou-se melhor solvente de extração do que a água ou o clorofórmio, tendo fornecido uma maior gama de compostos extraídos. A análise quantitativa por RMN permitiu a classificação dos cafés e a determinação da composição das misturas com base em marcadores químicos distintos associados aos cafés arábica e robusta.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

NMR Spectroscopy Used to Authenticate Coffee, chemistryviews.org/details/news/11280818/NMR_Spectroscopy_Used_to_Authenticate_Coffee.html (acedido em 23/12/2020).

I. W. Burton, C. F. Martinez Farina, S. Ragupathy, T. Arunachalam, S. Newmaster, F. Berrué, *J. Agric. Food Chem.* **2020**, *68*, 14643-14651. DOI: doi.org/10.1021/acs.jafc.0c06239.

Pós Funcionais: Resíduos de Frutas para Alimentos Mais Saudáveis



Crédito: ChemistryViews

A globalização dos mercados de frutas e vegetais gera superprodução, excedentes e resíduos potencialmente valiosos. A valorização desses subprodutos constitui um desafio para garantir a sustentabilidade na indústria alimentar, permitindo reduzir o seu impacto ambiental e reintroduzi-los na cadeia alimentar. Os pós de resíduos do processamento de frutas e vegetais, por exemplo, geralmente contêm compostos benéficos com propriedades antioxidantes, como polifenóis e

carotenoides, bem como fibra alimentar. No entanto, os efeitos do processamento e da digestão precisam ser compreendidos para avaliar os benefícios dos pós de frutas e vegetais na nutrição.

Noelia Betoret (Universidade Politécnica de Valência, Espanha), María José Gosalbes (Universidade de Valência e CIBERESP - Centro de Pesquisa Biomédica em Epidemiologia e Saúde Pública, Madrid, Espanha) e seus colaboradores prepararam pós de resíduos de dióspiro e mirtilo e investigaram como os processos de secagem e digestão afetam a libertação de antioxidantes e de outros compostos bioativos. Esta equipa de investigação também estudou os efeitos dos pós digeridos nas bactérias intestinais. Os pós foram preparados a partir de subprodutos, como casca e polpa, por liofilização ou secagem ao ar, seguida de moagem.

Os investigadores realizaram simulações *in vitro* da digestão, usando saliva humana e fluidos gástricos e intestinais simulados contendo enzimas digestivas. Após esse processo, mediram as propriedades anti-oxidantes dos pós, a quantidade de carotenoides nos pós de dióspiro e a quantidade de antocianinas (um tipo de pigmento polifenólico) nos pós de mirtilo. Verificaram que a origem do pó e o método de secagem influenciam a libertação de antioxidantes durante uma digestão simulada. Por exemplo, os pós de mirtilo têm propriedades antioxidantes significativamente melhores do que os pós de dióspiro devido às diferenças nas frutas. Resíduos de mirtilo liofilizados preservam mais antocianinas, mas estas são mais

facilmente degradadas durante a digestão do que as de amostras secas ao ar.

Neste estudo, os pós pré-digeridos foram também adicionados a culturas de bactérias intestinais de amostras fecais tendo sido analisadas as populações bacterianas resultantes após 24 horas. Os investigadores descobriram que a presença de pós de frutas pré-digeridas levou a um aumento de vários tipos de bactérias benéficas. Os investigadores atribuem este resultado aos efeitos seletivos de polifenóis e fibra alimentar em diferentes bactérias fecais. Concluíram ainda que os resíduos de mirtilo e dióspiro em pó poderiam ser incluídos em formulações de alimentos para melhorar o teor de carotenoides e antocianinas, o que poderá ter efeitos benéficos para a saúde.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

Powders from Fruit Waste for Healthier Foods, chemistryviews.org/details/news/1125204/Powders_from_Fruit_Waste_for_Healthier_Foods (acedido em 03/09/2020).

C. Bas-Bellver, C. Andrés, L. Seguí, C. Barrera, N. Jiménez-Hernández, A. Artacho, N. Betoret, M. J. Gosalbes, *J. Agric. Food Chem.* **2020**, *68*, 8080-8090. DOI: 10.1021/acs.jafc.0c02088.

O Trigo Moderno Contém Mais Glúten?

O trigo é um dos cereais mais importantes usados na produção de alimentos. Algumas proteínas do trigo podem desencadear problemas de saúde, como a doença celíaca, alergias ao cereal ou sensibilidade ao glúten ou ao cereal. Estes problemas tornaram-se mais comuns nas últimas décadas, tendo sido sugerido que sejam causados por um maior conteúdo de proteína imunorreativa nas variedades de trigo modernas comparativamente às do passado. A maior parte do teor de proteína do trigo é composta por glúten, uma mistura de diferentes proteínas. As proteínas do trigo são classificadas de acordo com as denominadas frações de Osborne de acordo com a sua solubilidade: albuminas solúveis em água; globulinas solúveis em soluções salinas; gliadinas solúveis em álcoois aquosos; gluteninas parcialmente solúveis em ácidos e bases diluídos e solúveis em álcoois. As reações imunológicas indesejadas são geralmente associadas às gliadinas.

Katharina Anne Scherf, da Universidade Técnica de Munique e do KIT - Instituto de Tecnologia de Karlsruhe (Alemanha), e colegas investigaram as diferenças na composição de proteínas em novas variedades de trigo e em outras mais antigas. Esta equipa investigou o conteúdo de proteína de 60 variedades de trigo de inverno alemãs do período entre 1891 e 2010, usando cinco variedades de trigo líderes de cada década. Cultivaram estas diferentes variedades em três anos (2015, 2016 e 2017) para avaliar os efeitos da genética, do ambiente e da sua interação.

Os investigadores descobriram que, em geral, as variedades modernas de trigo contêm um pouco menos de proteína do que as antigas. O conteúdo de glúten



Crédito: *ChemistryViews*

das variedades permaneceu praticamente constante ao longo das décadas. No entanto, a composição do glúten mudou: as proporções de gliadinas diminuíram significativamente com o tempo, enquanto o conteúdo em glutenina aumentou significativamente. Dado o facto de que certas gliadinas são frequentemente consideradas o tipo de proteína do glúten mais imunogénica, essas mudanças não sugerem qualquer associação entre as mudanças na composição da proteína devido ao melhoramento do trigo e o aumento de problemas de saúde relacionados com o seu consumo.

Estes investigadores também observaram que uma maior precipitação no ano da colheita originou um maior teor de proteína nas amostras. No geral, o ano da colheita, ou seja, as condições ambientais, tiveram um efeito mais significativo na composição da proteína do que a variedade de trigo. No entanto, estes cientistas advertem que os resultados deste trabalho não devem

ser generalizados dado que incluíram no estudo apenas cultivares de trigo de inverno alemães e que estes cresceram num único local na Alemanha.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

Does Modern Wheat Contain More Gluten?, chemistryviews.org/details/news/11259175/Does_Modern_Wheat_Contain_More_Gluten (acedido em 03/09/2020).

D. Pronin, A. Börner, H. Weber, K. A. Scherf, *J. Agric. Food Chem.* **2020**, *68*, 13247-13256. DOI: 10.1021/acs.jafc.0c02815.

Gorduras nos Alimentos – Influência no Sabor do Vinho

O vinho é consumido, muitas vezes, à refeição. No entanto, embora seja bem conhecido de qualquer provador ou escanção que o sabor do vinho se altera na presença de alimentos, a influência dos lípidos da dieta na adstringência e amargor do vinho, causados pelos taninos da uva, não está bem estabelecida do ponto de vista molecular. Os taninos são compostos polifenólicos responsáveis pelo amargor (sabor resultante da interação entre taninos e recetores de sabor localizados na cavidade oral) e adstringência (sensação perceptível atribuída principalmente à interação entre taninos e proteínas da saliva) de vinhos tintos. Certos alimentos reduzem essas sensações, melhorando o sabor do vinho. No entanto, não se sabe exatamente a razão por que isso acontece. Alguns estudos indicam que os taninos interagem com os lípidos a nível molecular. Nos alimentos, os lípidos são encontrados como glóbulos de gordura dispersos em líquidos ou sólidos.

Julie Géan (Universidade de Bordéus, Pessac, França) e colegas investigaram o modo como os taninos influenciam o tamanho e a estabilidade das gotículas de lípidos numa emulsão. Com a participação de voluntários, avaliaram também como o consumo prévio de óleos vegetais afeta o sabor dos taninos. Os investigadores prepararam uma emulsão de óleo em água usando azeite, água e um fosfolípido (emulsificante). De seguida, adicionaram catequina (um tanino de uva) e estudaram os lípidos na emulsão usando microscopia ótica, microscopia eletrónica e espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN). As distribuições de tamanho das gotículas foram medidas usando dispersão de luz estática. A equipa de investigação descobriu que o tanino se inseriu na camada de emulsificante que circundava as gotículas de óleo, originando a formação de gotículas maiores. Nos testes de sabor, os voluntários indicaram que o consumo de uma colherada de óleo de colza, de sementes de uva ou de azeite antes de provar

uma solução de tanino, reduziu a adstringência dos compostos. O azeite teve o maior efeito, fazendo com que os taninos fossem percebidos como frutados em vez de adstringentes. Combinando os resultados biofísicos e sensoriais, estes investigadores concluíram que os taninos podem interagir com as gotículas de óleo na boca, ficando menos disponíveis para se ligarem às proteínas da saliva e causar adstringência.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt



Crédito: ChemistryViews

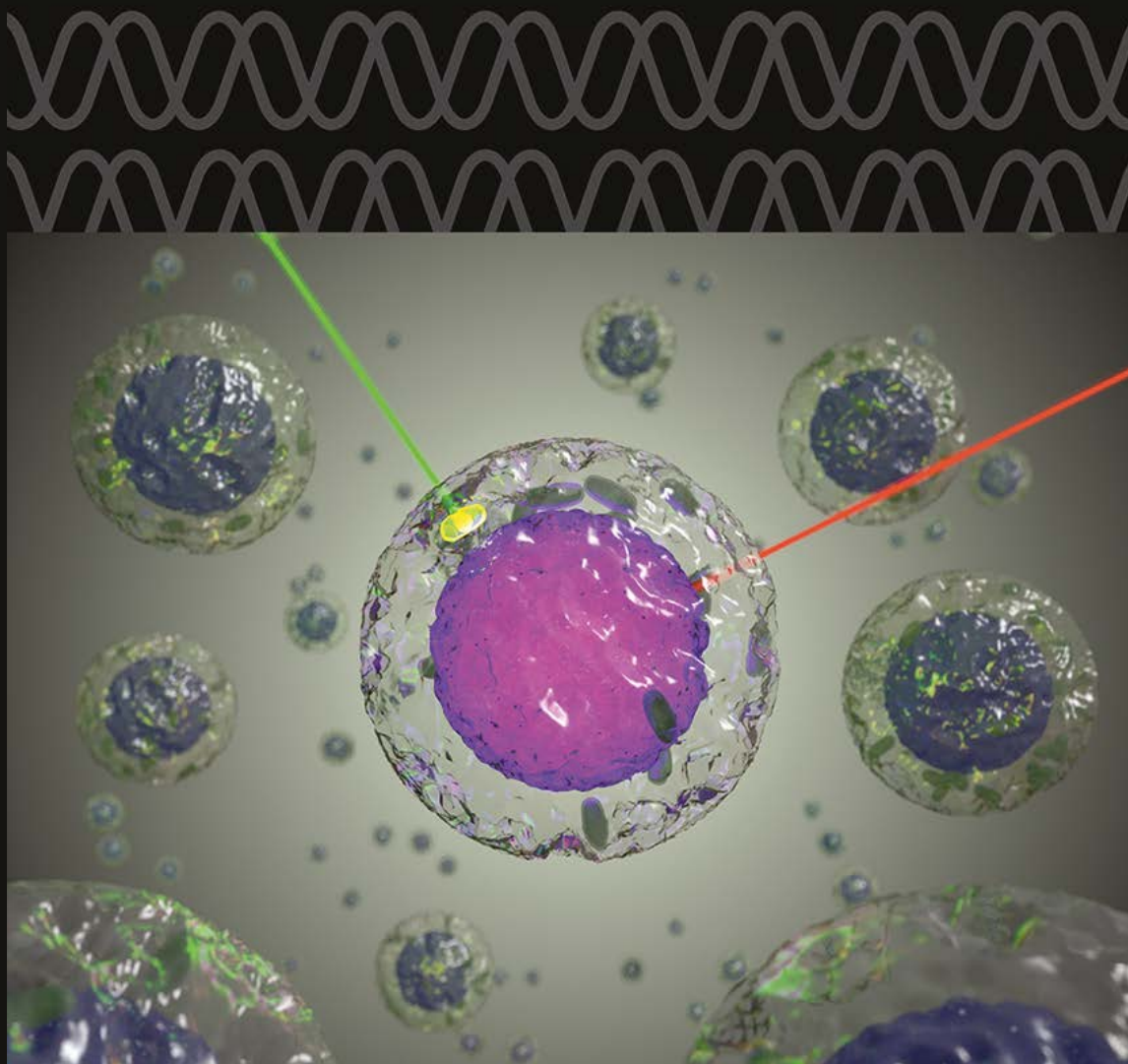
Fontes

How Fats in Food Influence the Taste of Wine, chemistryviews.org/details/news/11292901/How_Fats_in_Food_Influence_the_Taste_of_Wine.html (acedido em 16/03/2021).

A. Saad, J. Bousquet, N. F.-Castro, A. Loquet, J. Géan, *J. Agric. Food Chem.* **2021**, *69*, 3165-3174. DOI: 10.1021/acs.jafc.0c06589.

Analysis & Sensing

 **Chemistry
Europe**
European Chemical
Societies Publishing



WILEY-VCH

Analysis & Sensing

"A new society-led journal publishing quality research from across the global (bio)analytical chemistry community, including spectroscopy, probes, and imaging"



Jonathan Faiz
Editor-in-Chief

 **Chemistry
Europe**
European Chemical
Societies Publishing

URE-LOCKERS:

Inibição da Urease com Terapias de Nova Geração

>

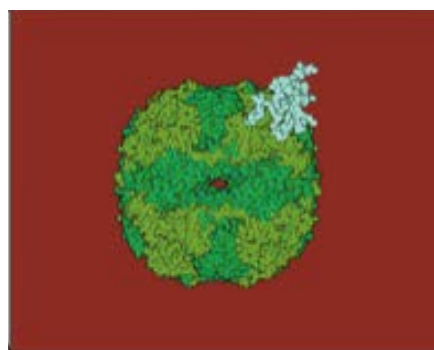
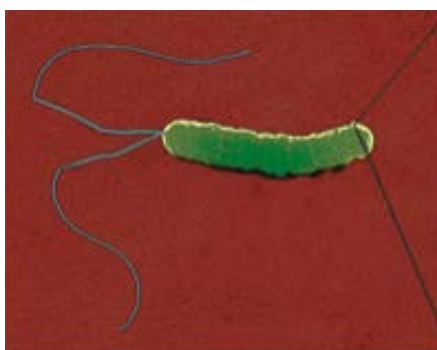
Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

• • • O uso generalizado de antibióticos de largo espectro tem contribuído para o aumento de resistência microbiana a antibióticos. Esta situação é particularmente preocupante em infeções por *Helicobacter pylori* que requerem tratamentos com múltiplos antibióticos por períodos prolongados. Estima-se que metade da população humana adulta tenha sido colonizada por esta bactéria que, para sobreviver no estômago, requer a metaloproteína urease para converter ureia em amónia e carbonato que, por sua vez, neutralizam o ácido no ambiente em torno da bactéria. Direcionar um tratamento contra esta enzima é, por conseguinte, uma alternativa com elevado potencial. Contudo, a descoberta de moléculas que inibam eficazmente este alvo tem sido limitada. Isto deve-se, em grande parte, à dificuldade de encontrar moléculas inibidoras que sejam estáveis no ambiente hidrolítico do estômago, assim como também devido a tempos de residência limitados e à baixa seletividade para a urease, o que

causa efeitos secundários. Neste contexto, é urgente que se desenvolvam novas abordagens de desenho de inibidores da urease da *H. pylori* que apresentem um balanço equilibrado entre afinidade e estabilidade. Os estudos realizados pela nossa equipa multidisciplinar levaram à descoberta de que dendrímeros de poliureia possuem a notável capacidade de ligação ao local ativo da urease de *Canavalia ensiformis* (vulgo feijão-cutelo ou fava-rica). Estes polímeros ramificados, produzidos por metodologias sustentáveis, são resistentes em meio ácido e podem também ser modificados quimicamente nos seus ramos terminais. Assim, este projeto está focado em desenvolver uma abordagem de triagem *in silico* e teste de modificações dos grupos terminais dos dendrímeros de poliureia para encontrar novos inibidores específicos da urease. Iremos ainda caracterizar a sua estabilidade, toxicidade e atividade inibitória em modelos *in vitro* e *in vivo*.

• • •



- Estabilidade no estômago
- Inibição molecular específica
- Elevado tempo de resistência



>

Ficha Técnica do Projeto

Nuno Martinho

Referência: PTDC/MED-QUI/3542/2020.

Financiamento: Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT).

Equipa: IBB/IST/Universidade de Lisboa

– Nuno Martinho (IR), Vasco D. B. Bonifácio (Co-IR), Sandra Pinto, Dalila Mil-Homens, Adriana Cruz; iNOvA4Health/Universidade

Nova de Lisboa – Jacinta Serpa

Novas Moléculas Pequenas para Optoeletrónica

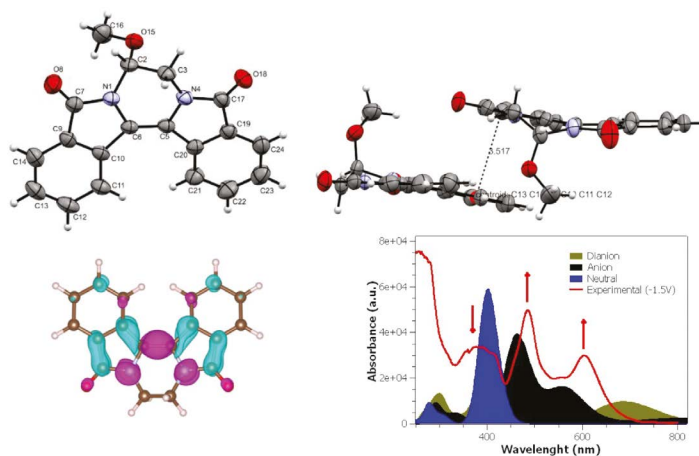
>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

• • • O desenvolvimento de dispositivos optoeletrónicos mais eficientes tem despertado um grande interesse tanto na área da química como na área da ciência dos materiais, tendo em vista uma miríade de aplicações, particularmente na eletrónica flexível. Os semicondutores orgânicos (OSCs) oferecem características exclusivas, tais como uma estrutura eletrónica e propriedades físico-químicas ajustáveis, funcionalidade, flexibilidade mecânica, e também hiatos óticos variáveis. Comparados com os seus equivalentes inorgânicos, os OSCs podem ser processados em grande escala e com baixo custo. Os transístores orgânicos de filme fino (OTFTs) e os díodos orgânicos emissores de luz (OLEDs) são particularmente importantes por constituírem os elementos-base de dispositivos eletrónicos e optoeletrónicos. Recentemente, desenvolvemos uma nova família de OSCs baseada num núcleo bisamida pentacíclico (*ChemComm* **2020**, 56, 14893–14896).

Quer os testes físico-químicos quer os testes *in silico* (cálculos DFT de parâmetros críticos) mostraram o enorme potencial de condução eletrónica e emissão de luz destes compostos. Este trabalho deu origem a uma patente nacional (PT116848) e foi alvo de uma comunicação oral no *ACS Spring Meeting 2021*. Utilizando metodologias sustentáveis pretendemos preparar mais compostos desta família, com melhores propriedades de condução eletrónica e absorção e emissão de luz no UV próximo e visível. Para concretizar este objetivo, é necessário adotar uma abordagem integrada da relação entre estrutura molecular e supramolecular, estudar em detalhe as suas propriedades eletroquímicas e fotofísicas, e avaliar o desempenho dos dispositivos. O objetivo principal deste projeto é a construção de dispositivos eletrónicos e optoeletrónicos otimizados, em termos de eficiência, custo e sustentabilidade relativamente aos que já existem no mercado.



>

Ficha Técnica do Projeto

Anthony J. Burke

Financiamento: LAQV-UÉvora

(UIDB/50006/2020), LAQV-UNL (UID/QUI/50006/2019, POCL-01-0145-FE-DER-016387 e PTDC/CTM-CTM/31983/2017), IT (UIDB/50008/2020) e UCC (05/PICA/B802/EC07).

Equipa: UÉ - Anthony J. Burke (IR), João P. Ramalho, Carolina Marques; UNL - Luís C. Branco, Hugo Cruz, Sandra Gago; IST, IT - Jorge Morgado; UCC, Irlanda - Simon Lawrence.

Rumo ao Estado Nativo com Ressonância Magnética Nuclear

>
João Medeiros-Silva

Towards the Native State with Nuclear Magnetic Resonance. *Biomolecules have evolved to function under specific cellular conditions. Yet, biological molecules are often studied in non-physiological settings due to the enormous technical challenge of studying them within their native media, especially for membrane proteins. Here, cutting-edge solid state NMR methods are described to study membrane proteins and antibiotics at high resolution directly in bacterial membranes. The obtained results indicate the existence of intricate and important structural features that are best perceived when those systems are studied in their physiologically relevant environment.*

As biomoléculas evoluíram de modo a executar as suas funções sob condições celulares muito específicas. Contudo, estas moléculas são geralmente analisadas em meios químicos pouco fisiológicos. Isto deve-se ao enorme desafio técnico em preservar as condições quimicamente nativas durante o estudo de biomoléculas, particularmente em proteínas membranares. Neste artigo são introduzidos novos avanços em RMN de estado sólido que possibilitam estudar com alta resolução proteínas membranares e certos antibióticos diretamente nas membranas celulares nativas. Esta abordagem ajudou a desvendar propriedades estruturais que são determinantes para o funcionamento destas biomoléculas e que se manifestam num contexto celular.

1. Introdução

A chave para entender o funcionamento de uma molécula está muitas vezes na sua estrutura. Em biologia estrutural utilizam-se nomeadamente as técnicas de cristalografia de raios-X, crio-microscopia eletrónica e ressonância magnética nuclear para resolver as estruturas das biomoléculas. Porém, cada uma destas técnicas possui certas limitações inerentes que afetam o estudo de sistemas biológicos heterogêneos e insolúveis, tais como proteínas de membrana e outras moléculas associadas a bicamadas lipídicas. A falta de ferramentas eficientes para estudar proteínas membranares limita o potencial de aplicações para estas moléculas que desempenham funções fundamentais nas células e que são os mais proeminentes alvos para a atuação de fármacos [1].

O estudo de proteínas membranares não é tarefa fácil, recorrendo frequentemente as membranas fosfolipídicas têm de ser substituídas por detergentes que acabam

por fornecer uma perspetiva simplificada, e não representativa, do que de facto acontece dentro da célula [2]. Para além disso, as propriedades destas proteínas são altamente suscetíveis às características da membrana onde estão inseridas. Levanta-se assim uma questão que até pode ser estendida a todo o tipo de biomoléculas: até que ponto é possível extrapolar as observações obtidas num tubo de ensaio para o que realmente acontece num contexto celular? Para tal, seria necessário investigar as biomoléculas *in-cell* ou pelo menos num ambiente químico o mais idêntico possível. Com esse objetivo, introduzem-se alguns dos mais recentes desenvolvimentos em espectroscopia de ressonância magnética nuclear que possibilitam estudar proteínas de membrana no seu estado nativo, e as implicações que estes estudos poderão trazer, por exemplo, para o desenvolvimento de novos antibióticos.

2. Ressonância magnética nuclear de estado sólido

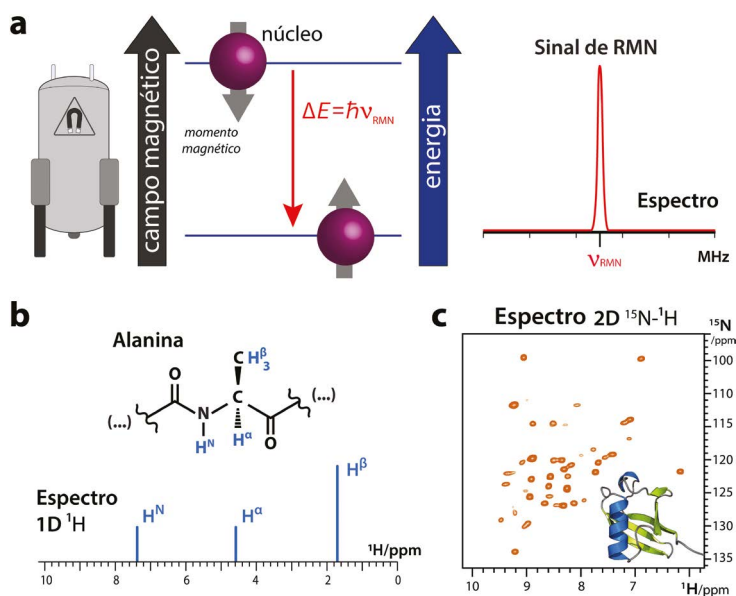
A espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma ferramenta versátil capaz de fornecer informação sobre as propriedades químicas e estruturais de uma molécula. Essencialmente, em RMN detetam-se transições energéticas do momento magnético do núcleo atômico quando este é sujeito a um campo magnético. Os núcleos de certos elementos químicos, como ^1H , ^{13}C ou ^{15}N , possuem uma propriedade magnética intrínseca denominada *spin*. Núcleos com *spin* comportam-se como ímãs que podem estar alinhados ou desalinhados com um campo magnético externo, tal como quando uma bússola aponta para o polo norte da terra. Quando o momento magnético nuclear transita de um estado energético para outro, o núcleo absorve ou liberta energia caracterizada por uma frequência específica e que pode ser registada num espectro de ressonância magnética nuclear da molécula (Figura 1a). Este espectro de frequências fornece informação química e estrutural acerca da molécula, pois os valores dessas frequências são extremamente sensíveis à estrutura e ambiente químico envolvente a cada um dos núcleos (Figura 1b). Além disso, estes núcleos – tal como ímãs – podem interagir uns com os outros e trocar energias caso estejam espacialmente próximos ou caso compartilhem ligações químicas. Desse modo, é possível correlacionar as frequências dos diferentes núcleos e representá-las em espectros de duas ou mais dimensões (*nD*). Por exemplo, no espectro 2D ^{15}N - ^1H de uma proteína, cada frequência de protão (^1H) está correlacionada com a respetiva frequência de nitrogénio (^{15}N) do grupo NH das ligações peptídicas. Dado que as frequências de ressonância dos núcleos são altamente sensíveis ao ambiente químico, este espectro 2D ^{15}N - ^1H representa uma impressão digital da proteína (Figura 1c).

Note-se ainda que o tipo de energias envolvidas em RMN está na gama das ondas de rádio, logo este tipo de frequências não compromete o estado da amostra. Portanto, a espectroscopia de RMN apresenta-se como uma técnica não invasiva em que é possível analisar um dado sistema com resolução atômica.

Contudo, a espectroscopia de RMN possui algumas limitações inerentes, especialmente no que respeita à análise de suspensões de partículas insolúveis ou sistemas biológicos relativamente grandes (> 50 kDa), como é o caso de proteínas inseridas em membranas lipídicas. Basicamente, estas limitações devem-se ao facto destas moléculas, devido ao seu tamanho ou às condições do sistema biológico, girarem lentamente sobre elas próprias na escala molecular. Para ultrapassar este problema,

os espectroscopistas giram mecanicamente as moléculas através de rotores orientados a $\approx 54,74^\circ$ relativamente ao campo magnético, naquilo que é chamado de *Magic Angle Spinning* (MAS) em RMN de estado sólido. Quando a amostra gira muito rapidamente ao longo deste ângulo mágico, ocorre um fenómeno em que os operadores quânticos das interações anisotrópicas dos núcleos se anulam, aumentando dramaticamente a resolução dos espectros de estado sólido. Atualmente, as velocidades de MAS atingem vários milhares de rotações por segundo (kHz), *i.e.* milhões de rotações por minuto. Graças a estes avanços tecnológicos (Figura 2) é agora possível analisar proteínas membranares com alta resolução diretamente dentro das células ou em condições quimicamente nativas [3,4]. Note-se que, apesar do nome, RMN de estado sólido não requer que a amostra esteja no *estado sólido*!

Figura 1 – (a) Transições entre estados de *spin* desalinhados/alinhados com o campo magnético libertam energia à frequência de ressonância (ν_{RMN}) do respetivo núcleo, originando um sinal no espectro de RMN. O símbolo \hbar corresponde à constante de Planck/ 2π . (b) Representação do espectro 1D ^1H de um resíduo de alanina. Cada ^1H está associado a uma frequência de ressonância específica que depende da estrutura, ambiente e propriedades químicas envolventes. Note-se que a escala nos espectros de RMN está representada em valores relativos *partes por milhão* (ppm) em vez de valores absolutos (MHz). Isto facilita a comparação de espectros obtidos por diferentes instrumentos de RMN, pois os valores absolutos das frequências de ressonância variam com o campo magnético enquanto que os valores relativos não variam. Para efeitos de exemplificação do espectro, as linhas foram exageradas e o acoplamento escalar *J* não foi representado. (c) Espectro 2D NH da ubiquitina. No espectro 2D NH são correlacionadas frequências de dois núcleos, neste caso ^1H e ^{15}N . Cada sinal está associado a um grupo N-H das ligações peptídicas para cada um dos aminoácidos da proteína, possibilitando assim obter informação química e estrutural localizada.



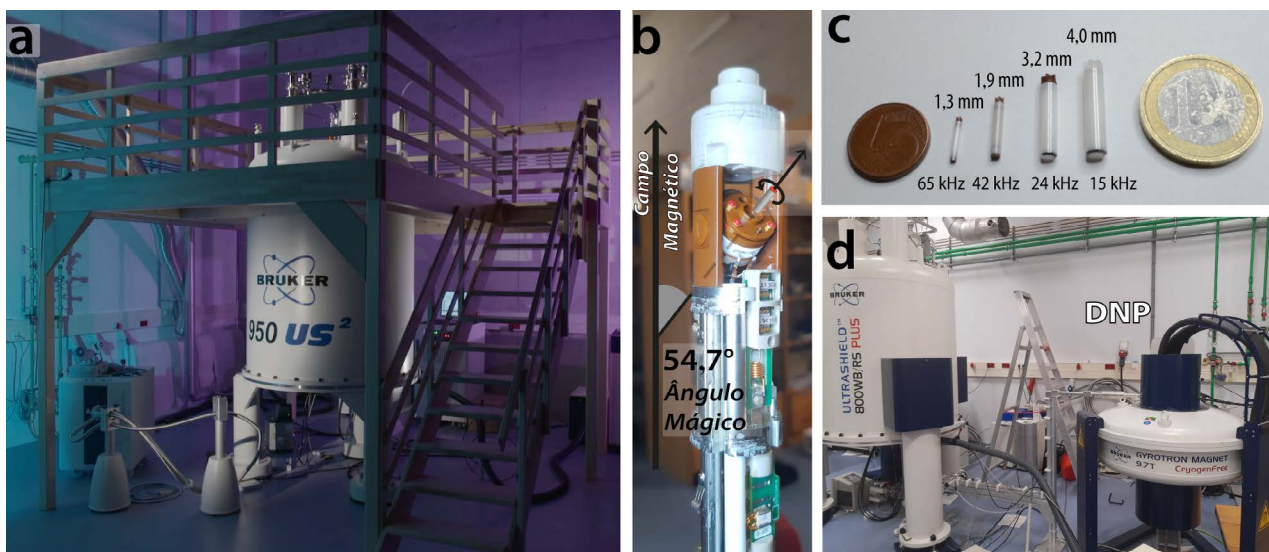


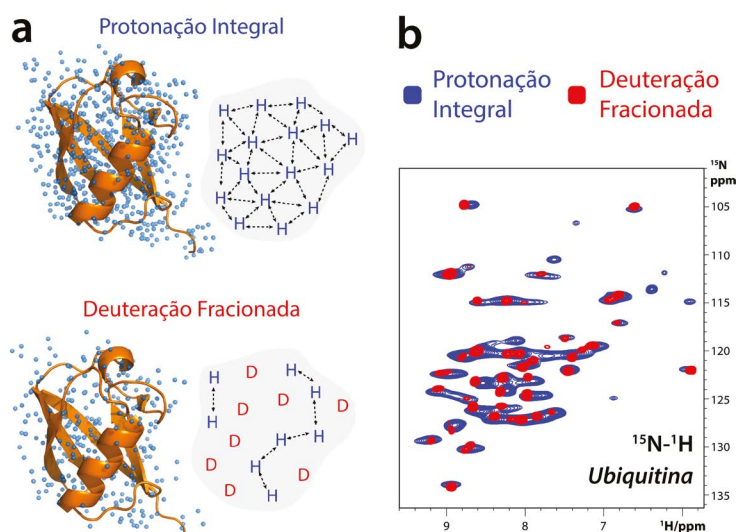
Figura 2 – Laboratório de RMN no Bijvoet Center da Universidade de Utrecht. (a) Espectrômetro de campo magnético ultra-alto de 22,2 T (950 MHz em próton). (b) Sonda de RMN onde se geram e detetam as radiofrequências. O rotor é colocado a um ângulo de $\approx 54,7^\circ$, denominado de *ângulo mágico*, relativamente ao campo magnético externo. Este valor *mágico* advém de que $(3 \cos^2 54,74^\circ) - 1 = 0$, e se a amostra girar com suficiente rapidez em torno deste ângulo, os valores dos operadores quânticos das interações nucleares anisotrópicas anulam-se. (c) As amostras são introduzidas em pequenos tubos cilíndricos de zircônio (*rotores*) de diversos diâmetros. Rotores mais pequenos podem atingir velocidades de rotação maiores que resulta numa melhor resolução do espectro obtido, porém a custo da intensidade de sinal devido à menor quantidade de amostra. (d) Dispositivo para experiências de DNP (Polarização Nuclear Dinâmica). O *girotrão* gera micro-ondas que são transferidas para o espectrômetro onde está inserida a amostra. Esta irradiação por micro-ondas pode gerar um sinal de RMN 600 vezes mais intenso!

3. Proteínas de membrana com resolução atômica

A análise de RMN de proteínas inseridas em membranas celulares, *i.e.*, em condições nativas, é extremamente difícil devido à baixa concentração da proteína na membrana celular e à elevada complexidade do espectro obtido. Com o recente desenvolvimento de campos magnéticos muito elevados (> 25 T, 1,2 GHz em próton), altas velocidades de MAS, polarização nuclear dinâmica (DNP, Figura 2d) e estratégias de deuteração, é agora possível analisar estes sistemas com alta resolução. No âmbito da tese de doutoramento do autor [5], foram desenvolvidas estratégias de deuteração para aumentar a intensidade e resolução dos sinais de próton em proteínas membranares.

O hidrogénio é o elemento mais abundante em proteínas e possui o núcleo (*i.e.*, próton, ^1H) com o maior momento magnético da tabela periódica dos elementos. Consequentemente, os prótons formam extensas redes de interações magnéticas dipolares entre si (Figura 3a) impedindo a leitura eficaz dos espectros das proteínas em RMN de estado sólido. Em contraste, o deutério (^2D) possui um momento magnético mais baixo e não forma interações tão fortes como o ^1H . Para além disto, o ^2D exibe uma frequência de ressonância magnética diferente de ^1H . Logo, ao substituir certos prótons da proteína por deutério, é possível aumentar dramaticamente a resolução do espectro obtido e selecionar certos domínios da proteína que se pretendem estudar (Figuras 3b e 4).

Figura 3 – (a) Representação da distribuição dos prótons (^1H , esferas azuis) numa proteína completamente protonada e parcialmente deuterada. A substituição parcial de ^1H por ^2D nas cadeias laterais dos aminoácidos reduz a densidade das redes de interações dipolares entre prótons. (b) Exemplo de um espectro 2D NH de estado sólido com deteção de próton, da ubiquitina parcialmente deuterada (vermelho) e completamente protonada (azul).



A substituição de ^1H por ^2D pode ocorrer através da permuta de grupos lábeis com o solvente, *e.g.* através dos grupos amida das ligações peptídicas. Já a substituição dos prótons alifáticos requer um caminho diferente, o ^2D pode ser introduzido através das fontes de carbono ou outras fontes nutricionais deuteradas presentes no meio de cultura do organismo que produz a proteína de interesse. Exemplos de estratégias de deuteração incluem a *Deuteração Fracionada* (FD) [6] e a *Deuteração Fracionada inversa* (iFD) [7] (Figuras 3 e 4), entre outras, dependendo do tipo de sistema a ser estudado [8]. No processo de FD, a proteína é expressa num meio de cultura contendo D_2O como solvente e glucose como fonte exclusiva de carbono. Isto resulta na protonação parcial das cadeias laterais dos aminoácidos e na deuteração integral dos grupos amida e $\text{C}\alpha$ da cadeia principal. Subsequentemente, os prótons poderão ser reintroduzidos nos grupos NH das amidas que estão expostas ao solvente por permuta química em H_2O . Em iFD aplica-se o conceito inverso, utilizando H_2O no meio de cultura e glucose deuterada. Deste método resulta a protonação dos grupos amida e $\text{C}\alpha$ da cadeia principal e deuteração parcial das cadeias laterais.

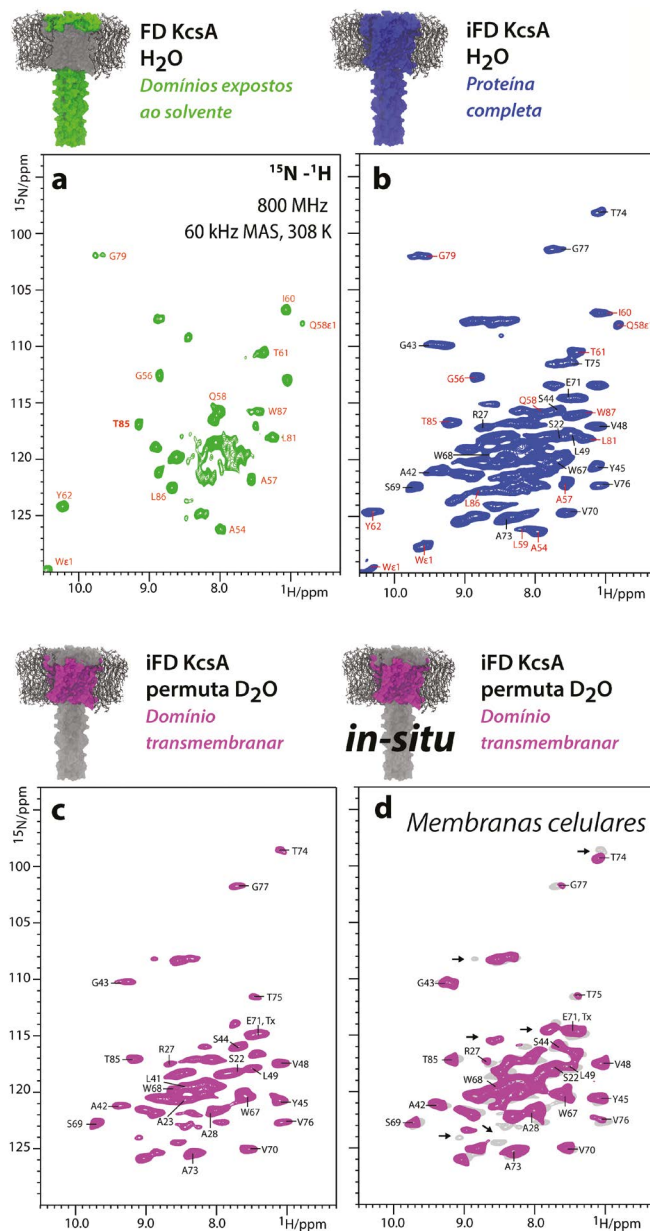
O aumento de resolução espectral conferido por estas estratégias permitiu, por exemplo, estudar pela primeira vez o ambiente químico dos prótons transmembranares do canal de potássio KcsA (Figura 4) [7,9,10] não só em lipossomas mas também diretamente em membranas celulares de *E. coli*, neste caso. Estes estudos em membranas explícitas desvendaram finalmente alguns dos mecanismos moleculares responsáveis pelo padrão de condutância de iões nesse canal de potássio. Curiosamente, a razão para o estranho perfil de condutância nestes canais está na dinâmica de movimento dos seus aminoácidos que é altamente afetada pelo ambiente químico [11]. Isto sublinha a importância em estudar não só a estrutura das biomoléculas, mas também a sua dinâmica, que é também acessível por RMN.

4. Balas mágicas na luta contra superbactérias

Com a rápida evolução das bactérias multirresistentes, ou *superbactérias*, é extremamente preocupante o ritmo com que estamos a ficar sem antibióticos, que são autênticos alicerces da medicina moderna. Projeta-se que possam ocorrer dez milhões de mortes relacionadas com infeções de superbactérias já em 2050 [12]. É, portanto, urgente desenvolver mais e melhores antibióticos, capazes de atuar através de mecanismos menos propensos ao desenvolvimento de resistência antimicrobiana.

Alguns antibióticos particularmente eficientes são aqueles que interferem com a regulação da parede celular, que é essencial para a sobrevivência das bactérias. A parede celular é composta por uma camada de peptidoglicano, regulada nas bactérias através do *Ciclo do Lipido II* (Figura 5). Certos antibióticos ligam-se e sequestram o lipido II, interferindo com a regulação da parede celular

Figura 4 – Espectros 2D NH de RMN de estado sólido com detecção de próton da KcsA em lipossomas de extratos lipídicos de *E. coli*. Diferentes estratégias de deuteração permitem selecionar diferentes domínios da proteína: (a) Deuteração Fracionada (FD); (b) Deuteração Fracionada inversa (iFD); (c) Deuteração Fracionada inversa, com permuta em D_2O . (d) Espectro da KcsA adquirido diretamente em membranas celulares de *E. coli* (magenta), sobreposto com o espectro representado em c) (cinza). Vários resíduos envolvidos no transporte de iões de potássio revelam-se sensíveis à composição da membrana (setas).



e levando à morte da bactéria. Antibióticos que atuam por essa via são altamente eficazes e menos propícios ao desenvolvimento de resistência antimicrobiana [13] – por esta razão o lipido II é considerado o *calcanhar de Aquiles* das bactérias. Alguns exemplos de antibióticos que actuam por esta via são a plectasina, a teixobactina, a tridecaptina A1 e a nisina [14].

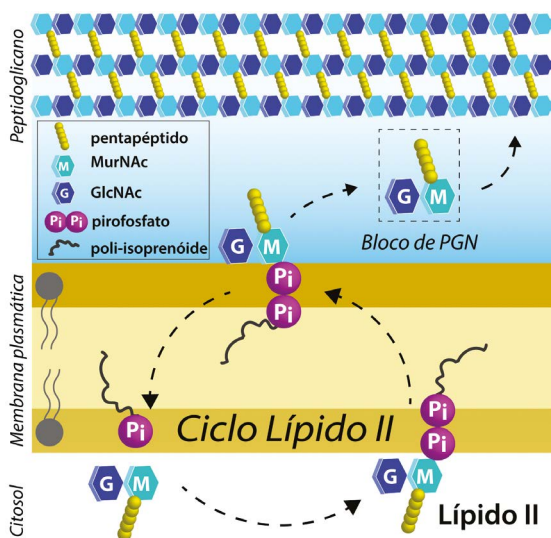


Figura 5 – A construção da parede celular de peptidoglicano depende da regeneração de lipido II através do Ciclo do Lipido II. Do lado interior da membrana plasmática é formado o lipido II, composto por uma subunidade de peptidoglicano e uma cadeia poli-isoprenoide ligadas através de uma ligação pirofosfato. Subsequentemente, o lipido II é transportado para o lado exterior da membrana onde enzimas especializadas polimerizam o peptidoglicano a partir dos monómeros transportados. Para simplificar a ilustração, os diversos intermediários e enzimas envolvidos no ciclo foram omitidos. Adaptada da ref. [11].

A nisina (Figura 6a) representa um caso particular pois ao ligar-se ao lipido II forma complexos porosos que rompem a membrana celular das bactérias (Figura 6b). Para além disto, a nisina liga-se especificamente ao grupo pirofosfato do lipido II, portanto a bactéria não pode simplesmente mutar um grupo fosfato e ganhar resistência. De facto, a nisina (também chamada de *bala mágica*) tem sido utilizada como conservante alimentar (E234) há mais de 50 anos e mostra um certo potencial para uso clínico no combate a superbactérias e biofilmes [15]. Para desenvolver novos derivados antibióticos de uma maneira eficiente e racional, é necessário conhecer a estrutura do complexo poroso nisina-lipido II. No entanto, a formação deste complexo requer uma membrana lipídica que dificulta imenso a sua investigação. Até muito recentemente, as únicas fontes de informação estrutural disponíveis foram obtidas através da utilização de detergentes ou solventes orgânicos. Utilizando RMN de estado sólido, foi agora possível obter dados estruturais do complexo poroso nisina-lipido II em membranas lipídicas (lipossomas), fornecendo a interface de ligação, topologia, estrutura e dinâmica do complexo ao mais alto detalhe [16]. Estes resultados mostram ainda que a informação estrutural previamente obtida em DMSO corresponde a um estado artificial do complexo (Figura 6c), sublinhando a importância de estudar as biomoléculas num meio químico biologicamente representativo.

Embora a utilização de lipossomas constitua um avanço nesta direção, as membranas das células

apresentam um ambiente químico muito mais complexo. Existem efeitos de *crowding*, solvatação, pH, diversos tipos de lípidos, proteínas e outras moléculas que podem influenciar a eficiência do antibiótico. Efetivamente, um dado antibiótico pode exibir atividades bastante distintas perante bactérias diferentes, tornando-se necessário identificar as propriedades responsáveis por estas variações.

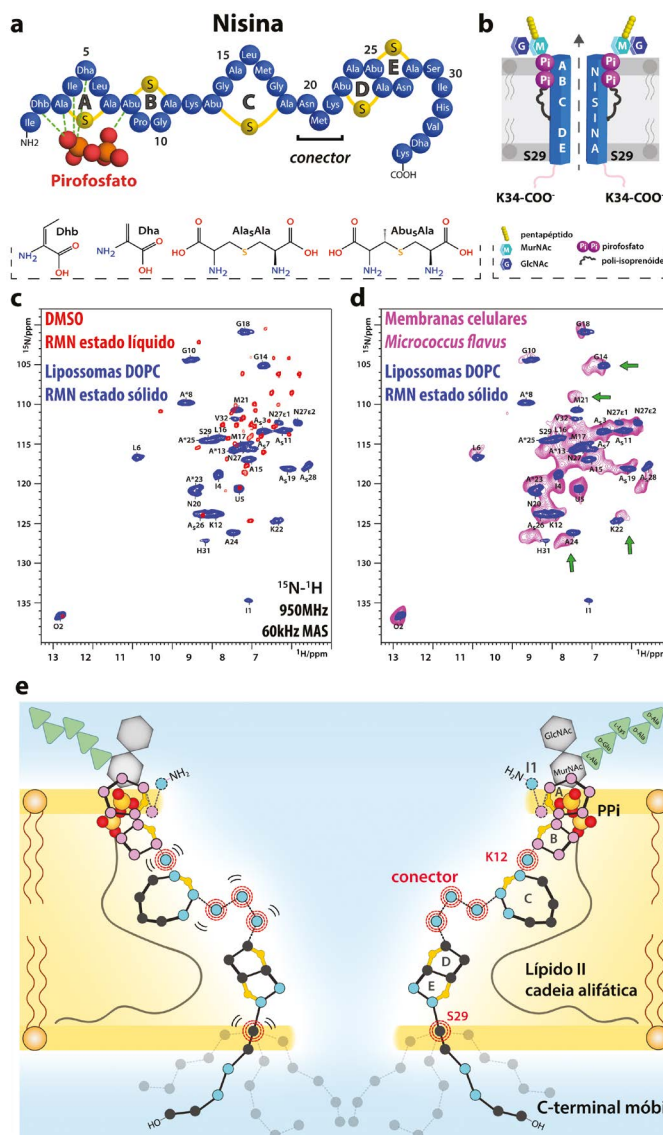


Figura 6 – (a) A nisina é um péptido composto por aminoácidos incomuns tais como desidroalanina (*Dha*), (*Z*)-desidrobutilina (*Dhb*), lantionina (*Ala Ala*) e 3-metil-lantionina (*Abu, Ala*) que formam cinco anéis (A-E) via ligações tioéter. (b) Os anéis AB ligam-se ao grupo pirofosfato do lipido II, enquanto que os anéis DE formam o poro. O anel C está envolvido na interface de dimerização. (c), (d) Espectro NH do complexo nisina-lipido II em DMSO (vermelho), em lipossomas (azul) e em membranas celulares de *Micrococcus flavus* (magenta). Os resíduos conectores são sensíveis à composição da membrana (setas). (e) Representação da topologia do poro. Os resíduos plásticos estão destacados com círculos vermelhos. Os resíduos expostos ao solvente estão representados a azul ciano. Adaptada da ref. [16].

Utilizando as últimas técnicas de RMN de estado sólido, foi possível estudar com uns escassos ca. 8 nmols o complexo nisina-lípido II diretamente nas membranas celulares de *Micrococcus flavus* (Figura 6d). Os resultados, suportados por outras medições de permuta $^1\text{H}/^2\text{D}$ e dinâmica molecular, mostram que os elementos conectores da nisina possuem características plásticas que adaptam a estrutura do poro nisina-lípido II às propriedades da membrana-alvo (Figura 6e). Esta adaptabilidade faz sentido do ponto de vista evolucionar, pois possibilita uma ampla e robusta ação do antibiótico para com os diversos tipos de bactérias com membranas diferentes. De facto, verificou-se que a remoção destes elementos conectores previne a formação de poros em bactérias com membranas mais espessas [17]. Curiosamente, estes elementos conectores são também altamente explorados para o *design* de novos derivados da nisina.

Em suma, o estudo da nisina em condições nativas possibilitou identificar características estruturais até agora desconhecidas e permitiu entender como certas

propriedades da membrana influenciam a interação com o antibiótico. Abordagens desta natureza são importantes para o desenvolvimento de novos antibióticos, e para identificar os atributos moleculares que conferem resistência às bactérias.

5. Conclusão

Os recentes avanços em RMN de estado sólido possibilitam investigar com alta resolução sistemas membranares complexos, tais como proteínas em membranas celulares. O estudo destas biomoléculas no seu estado nativo pode levar à descoberta de novas e importantes propriedades ou nuances estruturais que se manifestam num contexto celular.

Agradecimentos

A realização deste trabalho não seria possível sem o imenso apoio e dedicação do meu orientador de doutoramento Prof. Markus Weingarth, a quem agradeço imenso. Agradeço também ao Prof. Eurico Cabrita pelas suas discussões e sugestões ao artigo.

Referências

- [1] Y. Arinaminpathy, E. Khurana, D. M. Engelman, M. B. Gerstein, *Drug Discov. Today* **2009**, *14*, 1130–1135. DOI: 10.1016/j.drudis.2009.08.006.
- [2] C. Chipot, F. Dehez, J. R. Schnell, N. Zitzmann, E. Pebay-Peyroula, L. J. Catoire, B. Miroux, E. R. S. Kunji, G. Veglia, T. A. Cross, P. Schanda, *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 3559–3607. DOI: 10.1021/acs.chemrev.7b00570.
- [3] S. Narasimhan, S. Scherpe, A. L. Paioni, J. van der Zwan, G. E. Folkers, H. Ovaa, M. Baldus, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 12969–12973. DOI: 10.1002/anie.201903246.
- [4] R. Damman, S. Narasimhan, M. Weingarth, M. Baldus. Cellular Solid-State NMR Spectroscopy. In *In-cell NMR Spectroscopy: From Molecular Sciences to Cell Biology*; Royal Society of Chemistry, **2020**; pp 131–151. DOI: 10.1039/9781788013079-00131.
- [5] J. Medeiros-Silva. *Towards the Physiologically Relevant State with High-Resolution Solid State NMR*, Tese de Doutoramento em *Molecular Life Sciences*, Utrecht University, **2019**. dspace.library.uu.nl/handle/1874/385394.
- [6] D. Mance, T. Sinnige, M. Kaplan, S. Narasimhan, M. Daniëls, K. Houben, M. Baldus, M. Weingarth, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 15799–15803. DOI: 10.1002/anie.201509170.
- [7] J. Medeiros-Silva, D. Mance, M. Daniëls, S. Jekhmane, K. Houben, M. Baldus, M. Weingarth, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 13606–13610. DOI: 10.1002/anie.201606594.
- [8] B. Reif. Proton-Detection in Biological MAS Solid-State NMR Spectroscopy. In *Modern Magnetic Resonance*; Springer International Publishing, **2018**; pp 879–910. DOI: 10.1007/978-3-319-28388-3_69.
- [9] J. Medeiros-Silva, S. Jekhmane, M. Baldus, M. Weingarth, *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **2017**, *87*, 80–85. DOI: 10.1016/j.ssnmr.2017.03.003.
- [10] K. M. Visscher, J. Medeiros-Silva, D. Mance, J. P. G. L. M. Rodrigues, M. Daniëls, A. M. J. J. Bonvin, M. Baldus, M. Weingarth, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 13222–13227. DOI: 10.1002/anie.201705723.
- [11] S. Jekhmane, J. Medeiros-Silva, J. Li, F. Kümmerer, C. Müller-Hermes, M. Baldus, B. Roux, M. Weingarth, *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 123. DOI: 10.1038/s41467-018-07973-6.
- [12] J. O'Neill. Antimicrobial Resistance : Tackling a Crisis for the Health and Wealth of Nations. *Review on Antimicrobial Resistance*. **2016**, pp 1–16. wellcomecollection.org/works/rdpck35v.
- [13] S. F. Oppedijk, N. I. Martin, E. Breukink. *Biochim. Biophys. Acta - Biomembr.* **2016**, *1858*, 947–957. DOI: 10.1016/j.bbmem.2015.10.024.
- [14] J. Medeiros-Silva, S. Jekhmane, E. Breukink, M. Weingarth, *ChemBioChem* **2019**, *20*, 1731–1738. DOI: 10.1002/cbic.201800796.
- [15] J. M. Shin, J. W. Gwak, P. Kamarajan, J. C. Fenno, A. H. Rickard, Y. L. Kapila, *J. Appl. Microbiol.* **2016**, *120*, 1449–1465. DOI: 10.1111/jam.13033.
- [16] J. Medeiros-Silva, S. Jekhmane, A. L. Paioni, K. Gawarecka, M. Baldus, E. Swiezewska, E. Breukink, M. Weingarth, *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 3963. DOI: 10.1038/s41467-018-06314-x.
- [17] L. Zhou, A. J. van Heel, O. P. Kuipers, *Front. Microbiol.* **2015**, *6* (JAN). DOI: 10.3389/fmicb.2015.00011.

>

João Medeiros-Silva

Bijvoet Center for Biomolecular Research, Utrecht University, Utrecht, Países Baixos. Department of Chemistry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, USA.

Licenciado e mestre pela Universidade de NOVA de Lisboa e doutorado pela Universidade de Utrecht (Países Baixos, 2019). Atualmente é investigador do

Departamento de Química do Massachusetts Institute of Technology. O seu trabalho foca-se no desenvolvimento de metodologias em Ressonância Magnética Nuclear de estado sólido para analisar sistemas biológicos complexos ao nível atómico.

jmsilva@mit.edu

ORCID.org/0000-0003-3532-4390

Uma Catálise Alternativa Mais Sustentável: Ensinamentos da Química Verde

>
Nuno Martins

A More Sustainable Alternative Catalysis: Lessons from Green Chemistry. Latest challenges regarding global sustainability require more proactive than reactive positioning decisions, which must arise from a conscious discussion of society, encouraged by (non-)governmental agencies, and promoted by governments/agencies. Recently, this discussion has also been promoted by the young population (environmental activism sparked by the “Greta effect”). Decision-making must be based on technological and scientific knowledge to fulfil its purpose. It is here that science, in particular Chemistry, plays a vital role. Training chemistry besides the pursue of technical skills excellence must also disseminate global and systemic conscious and must produce professional people with the ability to fit their knowledge towards current problems in favour of sustainability. This paper reveals the research rational behind an eco-friendly chemical process, focused on the manufacturing and handling of more efficient and safe products.

Os desafios atuais em torno da sustentabilidade global exigem a tomada de posições mais pró-ativas do que reativas, e devem surgir de uma discussão consciente da sociedade, incentivada por agências (não) governamentais e promovida por governos/agências. Recentemente, esta discussão tem sido também incitada pela população jovem (ativismo ambiental exacerbado pelo “efeito Greta”). As tomadas de decisão devem sustentar-se no conhecimento técnico-científico sob pena de não servir o seu propósito. É aqui que o papel da ciência, em especial a Química, é vital. A formação em Química para além da excelência técnica também deve transmitir uma consciência sistémica e global, produzindo profissionais capacitados para adaptar o conhecimento às novas exigências em prol da sustentabilidade. Este artigo revela o racional implícito à pesquisa de um processo químico alternativo, mais ambientalmente responsável, com foco no fabrico e utilização de substâncias mais eficazes e seguras.

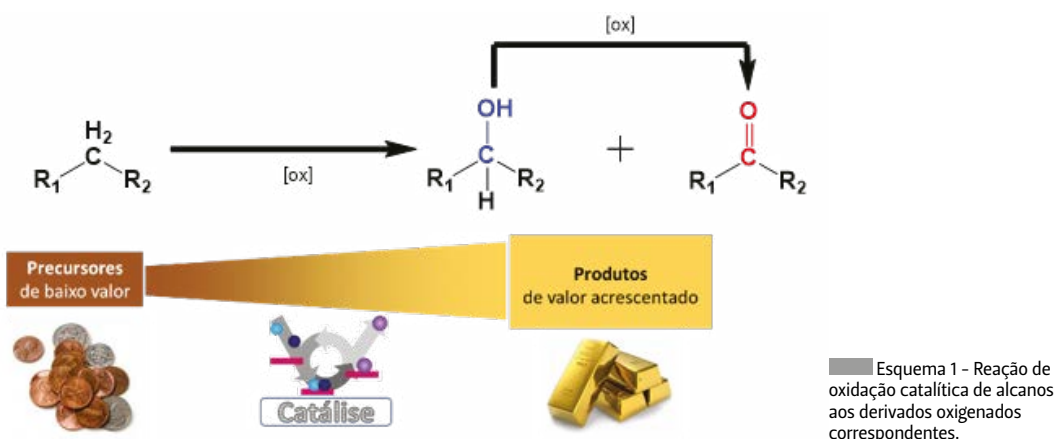
A influência da produção química

A Química, na sua elementar ação transformadora, já parafraseada para a eternidade por Lavoisier “nada se cria, nada se perde, tudo se transforma”, é transversal ao encadeamento produtivo. É uma área do conhecimento universal que afeta a uma miríade de processos desde a escala do miligrama em laboratório (ou mesmo à escala molecular no meio intracelular), até à produção em massa à escala das quilotoneladas em complexos industriais.

A Química Industrial representa um papel preponderante na economia global. Movimenta um capital

anual na ordem dos cinco triliões de euros com a comercialização ininterrupta de mais de setenta mil compostos fabricados com as mais variadas aplicações [1].

O ciclo de produção, juntamente com outras atividades (fornecimento, vendas, distribuição), compõe uma cadeia de valor (conceito introduzido por Porter em 1985) [2] de um determinado produto químico comercialmente disponível. Foquemo-nos no valor que pode acrescer da conversão química de uma matéria-prima num produto acabado. O valor acrescentado deste último dependerá essencialmente do propósito



e qualidade da sua ação/aplicação, ou seja, que propriedades físico-químicas e/ou biológicas apresenta e que benefícios aportam para o seu consumidor.

Um caso concreto é a transformação de um hidrocarboneto, relativamente abundante (constituente do petróleo), que acarreta um baixo valor acrescentado quando comparado com as correspondentes espécies hidrocarbonadas oxigenadas, ou seja, que exibem grupos funcionais do tipo álcool, aldeído, cetona ou carboxilo (Esquema 1). A incorporação de átomos de oxigénio na estrutura química de um alcano, por exemplo, converte-o num composto contendo propriedades completamente diferentes do seu precursor. Em geral, este tipo de produtos oxigenados possui diversas aplicações, nomeadamente na área alimentar, cosmética, farmacêutica, de materiais, entre outras.

Produzir interessa sim, mas e o ambiente?

Historicamente, são reconhecidos os benefícios de vários compostos químicos, não admirando então a massificação da sua produção desde o arranque da era da revolução industrial (sécs. XVIII-XIX).

Contudo, a produção em massa de compostos sintéticos provocou um inerente aumento crescente da quantidade de subprodutos químicos sem valor, por simplesmente não terem aplicação vantajosa no seu estado corrente, e por isso mesmo, serem considerados como resíduos. O seu descarte indiscriminado e acumulação com efeitos prejudiciais revela um “lado negro” da Química. A pesada “fatura ambiental” da acentuada degradação dos ecossistemas não atenuou com a evolução dos tempos. Pelo contrário, a poluição ambiental agravou-se mais nos últimos dois séculos do que em mais de dez mil anos de civilização humana. A inconsciência ou fraco conhecimento (notoriamente expresso em matéria e aplicação de legislação ambiental no acondicionamento, transporte e descarte de resíduos tóxicos ou perigosos) resultou

no descontrolo da poluição mundial.

Consequentemente, desde o séc. XX que a qualidade e quantidade de recursos naturais, sobretudo hídrico e atmosférico, têm vindo a ficar comprometidas. A sinceridade do atual secretário-geral da Nações Unidas, António Guterres, que referiu que “A minha geração falhou na resposta à emergência climática” (Conferência Mundial de Ministros Responsáveis pela Juventude 2019), expressa a inépcia ecológica global [3]. A deterioração ambiental constante e em crescendo agouram a chegada, cada vez mais eminente, de uma crise ambiental de proporções inéditas.

A Química Verde é a resposta, que veio para ficar!

A necessidade de mudança em torno da questão da sustentabilidade, não só de índole ambiental, mas também de carácter social e económico, dir-se-ia tardio e inicialmente tímido, atinge agora um espectro mais abrangente e com maior poder de ação. São de salientar agendas internacionais, como o Programa de Atuação Responsável, criado pela *Canadian Chemical Producers Association* (1984), que visam o fabrico zeloso, a segurança do processo, e o transporte e comércio de produtos químicos, privilegiando a saúde pública e a integridade ambiental [4]. Outro exemplo, é o programa de “Rotas Sintéticas Alternativas para Prevenção de Poluição”, levado a cabo pela *Environmental Protection Agency* (1991), na ressaca da publicação da lei norte-americana de Prevenção à Poluição, através do financiamento de projetos de proteção ambiental em processos químicos [5]. Este incentivo à produção de químicos de modo ambientalmente responsável ganhou uma maior relevância em 1993 com a inclusão de outras temáticas relacionadas, tais como a utilização de produtos químicos mais seguros e solventes menos tóxicos para o ambiente. Com isto, o termo “Química Verde” começava a ganhar maior notoriedade, con-

quistando mais espaço junto da academia, transitando para a indústria e desencadeando o desenvolvimento de processos químicos alternativos mais sustentáveis.

Na verdade, a Química Verde tornava-se a partir daí mais do que um termo ou conceito, mas sim um modo de repensar holisticamente as reações químicas. O culminar deste fenómeno viria a expressar-se em 12 princípios básicos. Anastas e Warner resumiram a definição do então recente termo convencionado: “a Química Verde é a utilização de um conjunto de princípios que reduz ou elimina o uso ou a geração de substâncias perigosas na conceção, fabrico e aplicação de produtos químicos” [6].

A relevância e aceitação da Química Verde têm sido corroboradas pelo aumento significativo de citações desta expressão em publicações científicas e conferências, também reforçada nas ações do Ano Internacional da Química em 2011 [7].

Catalisando a mudança de paradigma...

Tornar um processo químico mais sustentável passa por tornar uma determinada reação química mais eficiente, isto é, maximizar a quantidade de produto desejado e, simultaneamente, reduzir a quantidade de subprodutos indesejáveis gerados (economia atómica, ou seja, a maior parte dos átomos dos reagentes transitam para a estrutura dos produtos desejados) [8]. Isto induz um menor consumo de matérias-primas e energia, compactando os gastos de produção. Esta dinâmica desencadeia um efeito dominó em termos de benefícios, isto é, reduz-se o tempo para lidar com o material, as operações tornam-se mais simples, há menor produção de resíduos e diminuem-se os custos com acondicionamento, tratamento, transporte, eliminação e mão-de-obra.

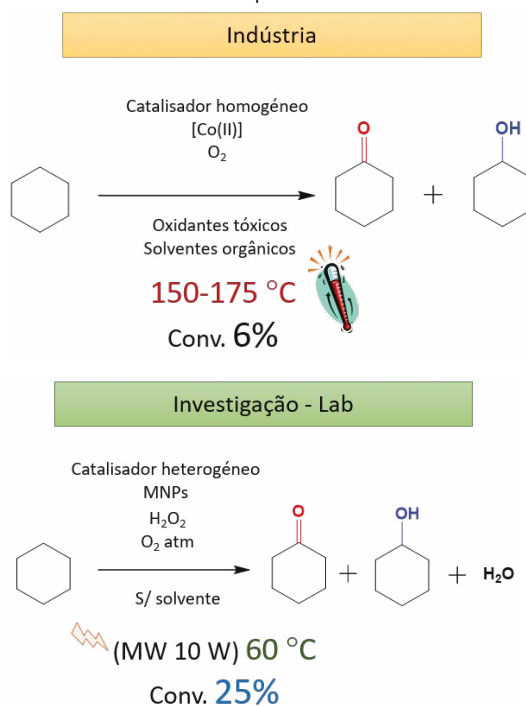
A obtenção de um ou mais produtos desejados pode ser mediada por agentes facilitadores de uma ou mais vias reacionais – os catalisadores. A catálise química tem como definição: “os processos nos quais a velocidade de reação química é aumentada pela interação entre reagentes e uma espécie externa, o catalisador, que é regenerado ao longo do processo e consegue atuar repetidamente” [9].

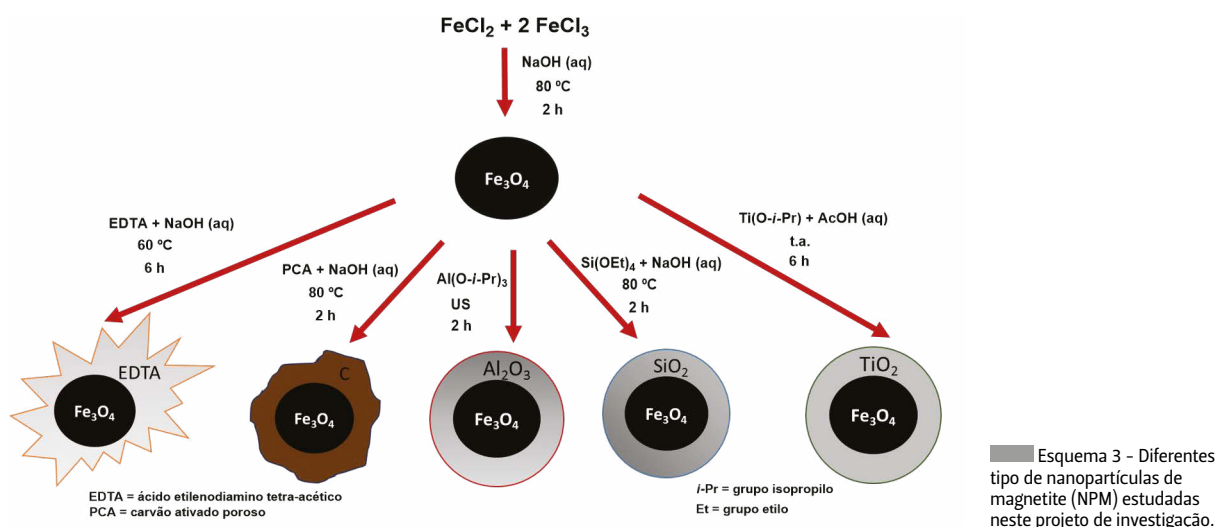
De facto, as virtudes da catálise possibilitam ganhos em duas frentes, nomeadamente a económica e a ecológica. Não é de estranhar que um dos 12 princípios fundamentais da Química Verde seja referente à catálise (n.º 9), fazendo jus à sua relevância na busca de processos químicos mais sustentáveis. Mundialmente, a Indústria Química fornece ao mercado cerca de 80% de produtos químicos obtidos com recurso a catalisadores, com a preparação anual de cerca de 70 kton de catalisadores contendo metais de transição e/ou refratários [10].

Oxifuncionalização catalítica: uma alternativa mais sustentável a um processo industrial

Os catalisadores baseados em metais de transição são comuns em diversos processos catalíticos industriais. Por exemplo, o designado processo AMOCO gira em torno da oxidação de alcanos catalisada por um composto de cobalto. A interação entre o par $\text{Co}^{\text{II}}/\text{Co}^{\text{III}}$ e agentes peroxidados originam espécies radicalares que por sua vez desencadeiam a reação com o O_2 . Este processo industrial convencional é utilizado na produção dos precursores ciclo-hexanol e ciclo-hexanona a partir do ciclo-hexano. Isto tudo para satisfazer o mercado da procura do *nylon*, no qual só a empresa Dupont é responsável pelo fabrico de várias megatoneladas por ano [11,12]. No entanto, este processo requer condições operacionais drásticas com temperaturas elevadas ($> 150\text{ }^\circ\text{C}$). Além disso, devido ao seu reduzido carácter seletivo, a conversão de produtos oxigenados é mantida entre 3 e 8% de modo a obter uma ordem de seletividade razoável ($\sim 85\%$) [11,13]. Este facto é ilustrativo da necessidade da implementação de novos processos mais económicos e ambientalmente responsáveis em alternativa aos processos convencionais industriais existentes. Daqui partiu a motivação do projeto de investigação para desenvolver um sistema alternativo para a oxidação de cicloalcanos (Esquema 2).

Esquema 2 - Processo industrial convencional e o processo alternativo proposto no projeto de investigação de produção de ciclo-hexanona e ciclo-hexanol a partir do ciclo-hexano.





A utilização de reagentes como o oxigénio atmosférico e o peróxido de hidrogénio (H_2O_2), conduzindo à formação de subprodutos como O_2 e H_2O , demonstra uma tentativa válida quanto à procura de um processo mais ecológico. No mesmo sentido, a exclusão à partida da utilização de solventes orgânicos evita o manuseamento e tratamento de efluentes. Além disso, o aquecimento a baixa potência por radiação micro-ondas poderá originar efeitos sinérgicos, provocados pelo efeito do aquecimento localizado.

Selecionando o catalisador...

A conceção dos catalisadores foi inspirada nos metais da primeira série de transição (Mn, Fe, Co, Ni, Cu e Zn), embora estes estejam aquém da *performance* dos catalisadores baseados em metais nobres, como a platina, por exemplo, porém menos abundantes e mais dispendiosos. Assumiu-se que a seleção do catalisador deve considerar o próprio método de síntese dos mesmos. Este deve procurar igualmente atender aos princípios da Química Verde. O que adiantaria uma tecnologia aparentemente “verde” se fosse precedida de um processo de obtenção de um agente químico (neste caso o catalisador) por um processo pouco sustentável?

Descobriu-se ao longo da investigação que um catalisador heterogéneo (diferente fase dos constituintes do meio reacional), neste caso sólido, faria mais sentido, pela facilidade da sua separação no final da reação e possibilidade da sua reutilização em reações futuras. Para tal, selecionou-se um material inerte (que não participa na reação química e é resistente às suas condições) para servir de suporte ao catalisador propriamente dito. A magnetite (Fe_3O_4) revelou-se um bom candidato para o efeito, em virtude da sua robustez química, mecânica e térmica, além da simplicidade do protocolo de preparação, através do uso

de reagentes de baixo custo e produção de poucos subprodutos. Acresce a sua versatilidade, relacionada com a suscetibilidade de modulação da superfície do material, como por exemplo a adição de revestimentos de natureza e camadas diferentes (Esquema 3) [14-16].

Adotou-se um método de preparação que reduziu ao máximo o tamanho das partículas, aumentando a área superficial por massa de material, minimizando também os problemas associados a fenómenos de transferência de massa e tempo de contacto na mistura reacional. *A priori*, reduzir a granulometria das nanopartículas magnéticas (NPMs) representaria uma desvantagem quanto à sua separação da mistura reacional, porém o seu poder de magnetização permitiria uma remoção facilitada com recurso a um simples íman (Figura 1) [14-16].

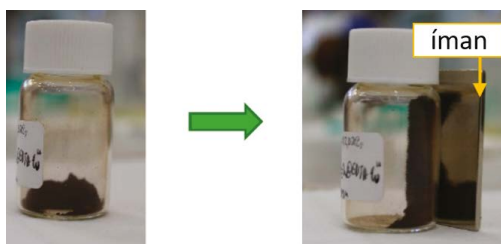


Figura 1 - Manipulação de NPM $\text{Fe}_3\text{O}_4@EDTA\text{-Cu}^{2+}$ com recurso a um íman.

Procurando a melhor performance...

Entre os vários tipos de pré-catalisadores preparados contendo o núcleo magnético, houve uma série que se destacou: as NPMs com o revestimento de sílica e iões Mn(II) ($\text{Fe}_3\text{O}_4@SiO_2\text{-Mn}^{2+}$) (Figura 2). Esta série revelou-se particularmente seletiva na conversão por peroxidação do ciclo-hexano em ciclo-hexanol e ciclo-hexanona, com um rendimento global até

24%, cerca de quatro vezes superior ao reportado pelo processo industrial (Figura 3). Estas NPMs foram reutilizadas em mais de cinco reações sucessivas com uma perda de atividade insignificante ao longo das várias reutilizações [17].

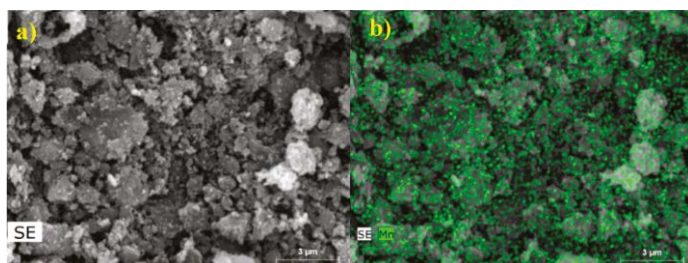


Figura 2 - Mapeamento por microscopia de varrimento eletrônico de $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2\text{-Mn}^{2+}$: a) micrografia bruta, b) micrografia com a sobreposição de detecção do elemento manganês.

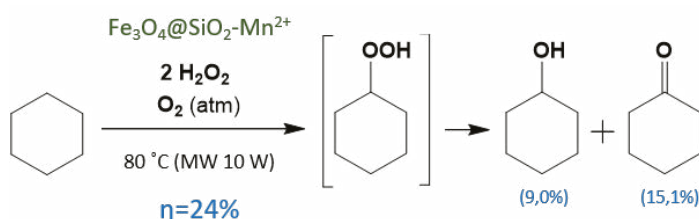


Figura 3 - Oxidação do ciclo-hexano catalisado por NPM $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2\text{-Mn}^{2+}$. Condições: catalisador (30 mg), substrato ($2,5\text{ mmol}$), H_2O_2 30% sol. aq. ($5,0\text{ mmol}$), $80\text{ }^\circ\text{C}$ (MW 10 W).

Futuro incerto, mas, pelo menos, mais “verde”

A Química Verde afirma-se como uma mudança de mentalidade da prática química. Esta induz-nos a sair da zona de conforto e ir além de tecnologias e matérias-primas convencionais.

Neste projeto, a inovação em catálise consistiu na forma disruptiva de combinar diferentes técnicas conhecidas, como o eletromagnetismo e ferramentas da nanotecnologia, sendo o mais fiel possível aos princípios da Química Verde para gerar uma solução potencialmente sinérgica. As características do sistema catalítico estudado: (i) protocolo ecológico simples; ii) uso de reagentes de custo reduzido e sem recurso a solventes orgânicos; iii) aquecimento de baixa energia usando micro-ondas; iv) separação magnética prática; e v) estabilidade e reutilização do precursor catalítico, constituem um contributo válido com vista à afirmação de processos químicos mais sustentáveis.

Desejam-se mais e maiores descobertas, numa contribuição plural de todos, para que esse todo seja mais do que a simples soma das partes. Que faça parte dum processo contínuo de melhorias a fim de transformar e capitalizar os riscos em oportunidades mais “verdes”.

Agradecimentos

Agradeço aos orientadores K. Mahmudov, L. M. D. R. S. Martins e A. J. L. Pombeiro, bem como o financiamento da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) através de um bolsa de doutoramento (SFRH/BD/52371/2013).

Referências

- [1] Oxford economics website, oxfordeconomics.com/recent-releases/the-global-chemical-industry-catalyzing-growth-and-addressing-our-world-sustainability-challenges (acedido em 15/03/2020).
- [2] M. E. Porter, *The Competitive Advantage: Creating and Sustaining Superior Performance*. NY: Free Press, **1985**.
- [3] Jornal Público on-line, publico.pt/2019/06/23/sociedade/noticia/antonio-guterres-geracao-falhou-resposta-emergencia-climatica-1877392 (acedido em 14/03/2020).
- [4] AIChE, Canada's Chemical Industry: Evolving with the Times, [aiche.org/resources/publications/cep/2019/october/canadas-chemical-industry-evolving-times](https://www.aiche.org/resources/publications/cep/2019/october/canadas-chemical-industry-evolving-times) (acedido em 14/03/2020).
- [5] EPA, *The Effects on Industry of Environmental Protection Regulations (1991)*, [epa.gov/environmental-economics/effects-industry-environmental-protection-regulations-1991](https://www.epa.gov/environmental-economics/effects-industry-environmental-protection-regulations-1991) (acedido em 15/03/2020).
- [6] P. T. Anastas, J. Warner, "Green Chemistry: Theory and Practice", Oxford University Press: Oxford, **1998**.
- [7] UN website, [un.org/en/events/chemistry2011](https://www.un.org/en/events/chemistry2011) (acedido em 14/03/2020).
- [8] R. A. Sheldon, *Chem. Tech.* **1994**, *24*, 38-47. Disponível em: ostl.gov/biblio/7109196.
- [9] IUPAC Compendium of Chemical Terminology, Electronic version by S. J. Chalk, goldbook.iupac.org/C00876.html (acedido em 26/01/2020).
- [10] I. Gaballah, M. Djona, J. C. Mugica, R. Solozobal, *Res. Conserv. Rec.* **1994**, *10*, 87-96. DOI: 10.1016/0921-3449(94)90041-8.
- [11] G. Duca, "Homogeneous Catalysis with Metal Complexes in the Chemical Industry and Foodstuffs Chemistry, Homogeneous Catalysis with Metal Complexes: Fundamentals and Applications," Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **2012**, pp. 423-465.
- [12] M. Costas, K. Chen, L. Que Jr, *Coord. Chem. Rev.* **2000**, *200-202*, 517-544. DOI: 10.1016/S0010-8545(00)00320-9.
- [13] P. V. Saji, C. Ratnasamy, S. Gopinathan, US Patent 6,392,093B1, **2002**.
- [14] N. M. R. Martins, L. M. D. R. S. Martins, C. O. Amorim, V. S. Amaral, A. J. L. Pombeiro, *Catalysts* **2017**, *7*, 222. DOI: 10.3390/catal7070222.
- [15] N. M. R. Martins, L. M. D. R. S. Martins, C. O. Amorim, V. S. Amaral, A. J. L. Pombeiro, *Catalysts* **2017**, *7*, 335. DOI: 10.3390/catal7110335.
- [16] N. M. R. Martins, A. J. L. Pombeiro, L. M. D. R. S. Martins, *Cat. Comm.* **2018**, *116*, 10-15. DOI: 10.1016/j.catcom.2018.08.002.
- [17] N. M. R. Martins, A. J. L. Pombeiro, L. M. D. R. S. Martins, *Cat. Comm.* **2019**, *125*, 15-20. DOI: 10.1016/j.catcom.2019.03.015.

>

Nuno Martins

Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa. Desenvolveu o seu projeto de doutoramento em Engenharia Química (Programa CATSUS) no Centro de Química Estrutural do Instituto Superior Técnico,

Universidade de Lisboa. Atualmente, desempenha funções de gestor de laboratório e engenheiro de processo em I&D e produção industrial na Solvay Portugal. nuno.martins@solvay.com
ORCID.org/0000-0001-7787-6041

Captura e Conversão de Dióxido de Carbono: a Promoção de um Resíduo a Produto de Valor Acrescentado

>
Sara Realista

Capture and Conversion of Carbon Dioxide: the Promotion of a Waste to an Added Value Product. *Climate change has been one of the most discussed issues of our society. The main character of this novel has been carbon dioxide that became a villain when its atmosphere concentration reached dangerous values, affecting Earth's thermal stability. The scientific community gathered forces to develop more sustainable methods to convert this molecule into others that are useful to fulfil society's needs. During this work, new catalysts were synthesised to convert CO₂ using visible light. Catalyst design allowed to obtain methane, one of the main components of natural gas, from the CO₂ conversion using visible light.*

As alterações climáticas são um dos temas mais debatidos nos dias de hoje. O principal ator desta novela tem sido o dióxido de carbono (CO₂) que, quando começou a atingir níveis perigosos na atmosfera, passou a vilão afetando a estabilidade térmica da Terra. A comunidade científica uniu esforços e começou a pensar em vias sustentáveis para converter esta molécula noutras que podem ser úteis para satisfazer as necessidades da sociedade. Neste trabalho, desenvolveram-se catalisadores para a conversão de CO₂ ativada por luz visível. Através do desenho dos catalisadores foi possível detetar a formação de metano, que é um dos componentes maioritários do gás natural, através da conversão de CO₂ com luz.

CO₂ e as alterações climáticas

Nos últimos tempos, muito se tem falado das emissões de CO₂ e das suas consequências para o planeta Terra. Aquecimento global e alterações climáticas têm vindo a ser debatidas pelo mundo junto da sociedade civil e política com o intuito de se tomarem ações que possam mitigar este problema. Antes de se mergulhar nas soluções propostas por vários cientistas em todo o mundo, dever-se-á primeiro refletir sobre o CO₂ e o seu papel nesta temática.

O CO₂ é um dos principais intervenientes no ciclo de carbono (Figura 1) que é constituído pelos vários reservatórios de carbono (rochas, oceanos, solo, atmosfera) e pelos fluxos que existem entre eles.

Estes fluxos ocorrem devido a diferentes processos físicos, químicos, geológicos e biológicos, e quando em equilíbrio ajudam a manter a temperatura da Terra estável. O CO₂ participa ativamente neste ciclo, principalmente por ser um gás de efeito de estufa, o que faz com que aprisione parte da energia que provém do sol, mantendo a temperatura terrestre ideal para o desenvolvimento de seres vivos. Qualquer desequilíbrio provocado neste ciclo leva a que a temperatura na Terra se altere com consequentes efeitos drásticos e irreversíveis, como por exemplo, o degelo dos glaciares levando ao aumento do nível médio dos oceanos [1].

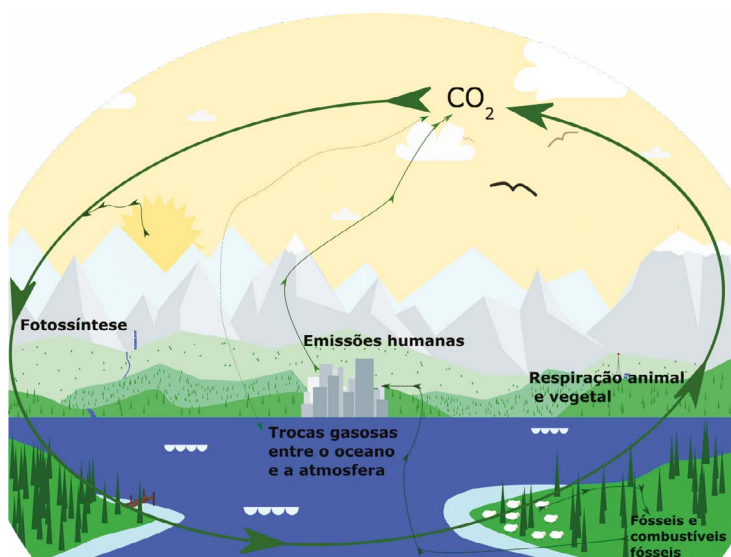


Figura 1 - Os vários reservatórios de carbono e os fluxos entre eles que constituem o ciclo de carbono.

Este desequilíbrio tem sido maioritariamente provocado pelo Homem, e foi depois de 1950, quando decorreu a terceira revolução industrial, que os níveis de CO_2 começaram a aumentar até aos níveis perigosos dos dias de hoje (Figura 2) – aumentaram de 280 ppm (partes por milhão) para mais de 420 ppm de CO_2 na atmosfera e continuam a subir [2]!

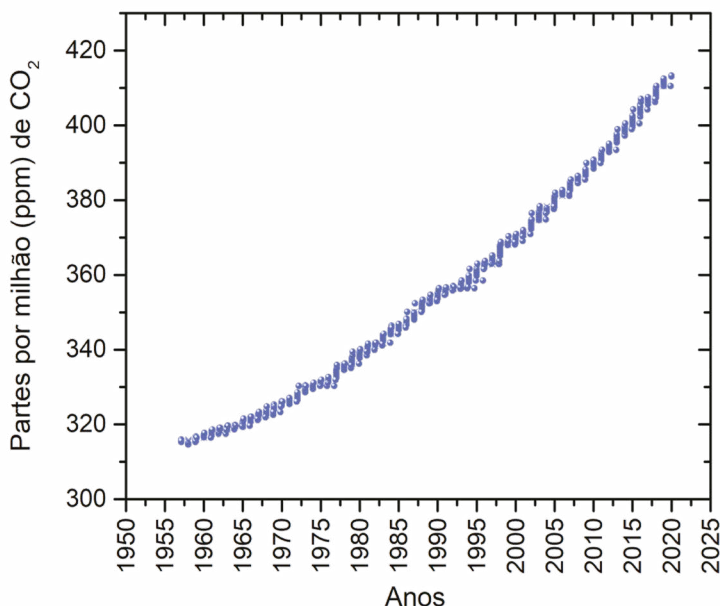
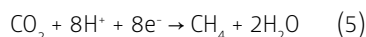
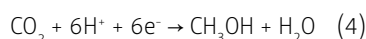
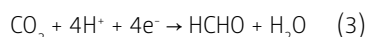
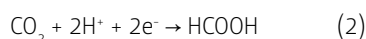
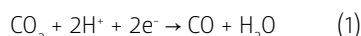


Figura 2 - Níveis atmosféricos de CO_2 medidos no Observatório de Mauna Loa no Havai. O gráfico mostra apenas os resultados depois do momento em que os níveis de CO_2 iniciaram a sua subida nunca vista. O início desta subida é coincidente com o início da terceira revolução industrial. Os dados para construção do gráfico foram retirados do site da NASA (Administração Nacional de Aeronáutica e Espaço, Estados Unidos da América).

Um para todos e todos para um!

Com o aumento da concentração de CO_2 na atmosfera, tornou-se necessário desenvolver novos materiais e métodos para a remoção deste gás da atmosfera, surgindo a possibilidade da sua captura e/ou conversão em produtos que possam ser reutilizados pela sociedade. Já existem alguns exemplos do uso de CO_2 na indústria, nomeadamente no processamento de alimentos, como por exemplo, no fabrico de refrigerantes. Mas os cientistas querem ir mais longe! Querem poder utilizar este gás como fonte de carbono para a obtenção de outros químicos que possam ser usados como combustíveis, fármacos, entre outros [3].

Numa primeira instância, em quê e como é que pode ser convertido o CO_2 ? O CO_2 pode ser convertido em monóxido de carbono (CO), ácido fórmico (HCOOH), formaldeído (HCHO), metanol (CH_3OH) e metano (CH_4), através da sua redução mediada por prótons e eletrões (Equações 1-5).



Contudo, a obtenção destes diferentes produtos depende do número de eletrões e de prótons necessários para obter cada um, sendo mais favorável a produção de CO, que necessita apenas de dois eletrões e dois prótons, do que a produção de CH_4 para a qual são precisos oito eletrões e oito prótons [4]. A conversão de CO_2 é um grande desafio não só pelo desejo de obter apenas um produto entre os vários que podem ser obtidos, mas também pela existência de reações competitivas, como a redução do próton a hidrogénio molecular (H_2). É neste momento que entram moléculas com metais na sua estrutura (compostos de coordenação) que têm a possibilidade de ser desenhadas e sintetizadas especificamente para serem mais seletivas, ou seja, originar apenas um produto pela conversão de CO_2 [5].

A catálise tem sido uma das abordagens mais frequentes à conversão de CO_2 , porque permite o uso de um composto (catalisador) que acelera uma reação sem ser consumido. Os compostos de coordenação têm sido usados como catalisadores ao longo dos anos para inúmeras transformações químicas, como por exemplo, no processo de Monsanto para a formação de ácido acético (usado na produção de

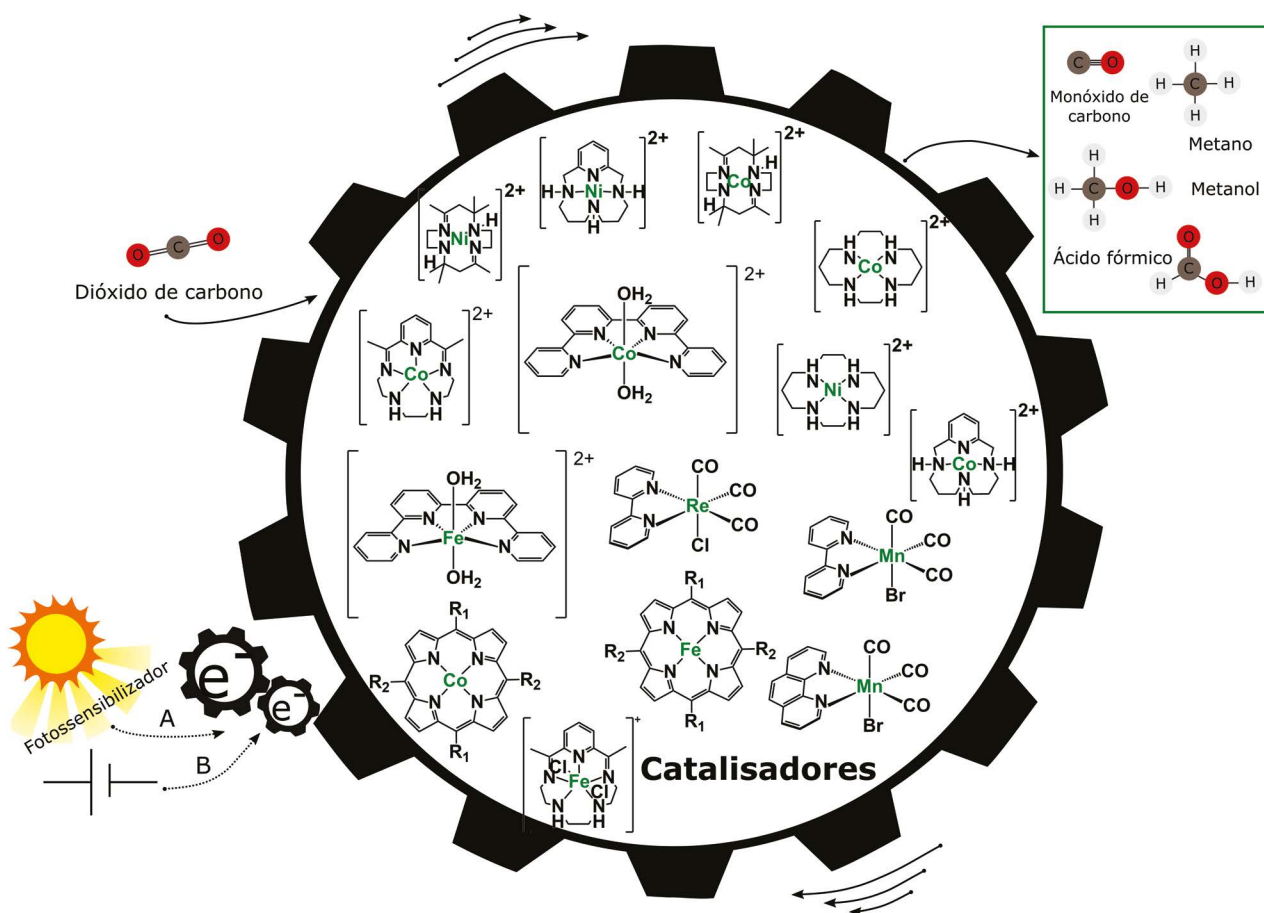
garrafas de plástico). A fotorredução (Figura 3, via A) e a eletorredução (Figura 3, via B) catalisada de CO_2 têm sido as metodologias mais aplicadas para esta reação e surgem como alternativas mais verdes e fáceis de manipular quando comparadas com a catálise química. Como mencionado anteriormente, a conversão de CO_2 é mediada por elétrons que na via A são provenientes de uma molécula que os fornece após exposição à luz, enquanto que na via B é a energia elétrica que liberta os elétrons. Os elétrons ativam os catalisadores (Figura 3) que depois vão converter o CO_2 em moléculas que podem ser utilizadas para satisfazer direta- ou indiretamente as necessidades da sociedade moderna, como por exemplo, em combustíveis, na alimentação, na síntese de fármacos, etc. [6].

CO_2 vê a luz – conversão de CO_2 através de luz visível

A fotorredução de CO_2 tem sido uma via bastante atrativa tendo em conta que em última instância a luz solar pode ser usada como iniciadora do processo catalítico. Encontrar catalisadores que sejam seletivos para a conversão de CO_2 através da luz visível foi o objetivo do trabalho desenvolvido durante o projeto de doutoramento.

A escolha recaiu em catalisadores à base de criptandos. Jean-Marie Lehn foi o investigador responsável pelo nascimento destes compostos e o seu desenvolvimento valeu-lhe o prémio Nobel da Química em 1987 [7]. Os criptandos são moléculas orgânicas bicíclicas contendo átomos doadores de nitrogénio ou oxigénio (círculos verdes na Figura 4) que se assemelham a uma “gaiola”. Estas gaiolas coordenam aos metais originando os criptatos (Figura 4). Depois da formação do criptato, podem acomodar-se uma grande variedade de aniões (iões com carga negativa). Esta “gaiola” pode ser modificada de forma a aprisionar diferentes tipos de aniões, através da modificação da flexibilidade dos braços do criptando e da distância entre os metais.

Figura 3 - Vias catalíticas abordadas neste artigo: fotorredução (via A) e eletorredução (via B). Na imagem estão também representados os catalisadores mais usados na conversão de CO_2 e os produtos desta reação que podem ser reutilizados pela sociedade.



Jane Nelson e seus colaboradores [8] descobriram que os criptandos da Figura 5 são capazes de capturar CO_2 da atmosfera e convertê-lo em anião bicarbonato (HCO_3^-) depois da coordenação com diferentes metais: cobalto (Co), zinco (Zn), níquel (Ni) e cobre (Cu). De facto, estes compostos seguem o mecanismo adotado pelas anidrases carbônicas, que se trata de uma família de enzimas responsáveis pela conversão de CO_2 no anião bicarbonato em humanos, bactérias, algas, plantas, entre outros [9]. Esta semelhança demonstra o potencial deste tipo de compostos para mimetizar processos já encontrados na natureza!

Mais tarde Moller e a sua equipa [10,11] desenvolveram que alterações nas estruturas destes

criptatos (Figura 5) tinham influências dramáticas na seletividade para determinados aniões. Neste projeto pretendeu-se entender esta influência tanto na captura de CO_2 como na sua conversão em produtos de valor acrescentado. Assim prepararam-se quatro criptatos de cobalto diferentes que estão representados na Figura 6. Durante o trabalho que estava a ser realizado no âmbito deste projeto [12], Zhong, Lu e seus colaboradores [13] publicaram um criptato de cobalto semelhante, capaz de converter com elevada eficiência e seletividade CO_2 a CO usando luz visível (LED azuis). O CO não pode ser usado diretamente pela sociedade, mas pode ser usado como precursor na síntese de combustíveis ou de fármacos.

Figura 4 - Criptandos e criptatos. As linhas verdes representam os “braços” do criptando que contêm na sua estrutura átomos doadores (N e O, estes últimos representados por círculos verdes) que vão coordenar metais. Após a coordenação do metal ao criptando, originando um criptato, este pode acomodar diferentes aniões entre os dois centros metálicos com elevada seletividade.

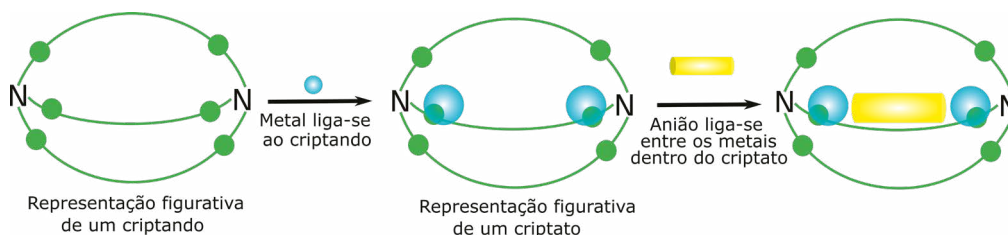


Figura 5 - Os criptandos sintetizados por Jane Nelson e seus colaboradores que são capazes de capturar CO_2 da atmosfera e convertê-lo em anião bicarbonato (HCO_3^-) [8].

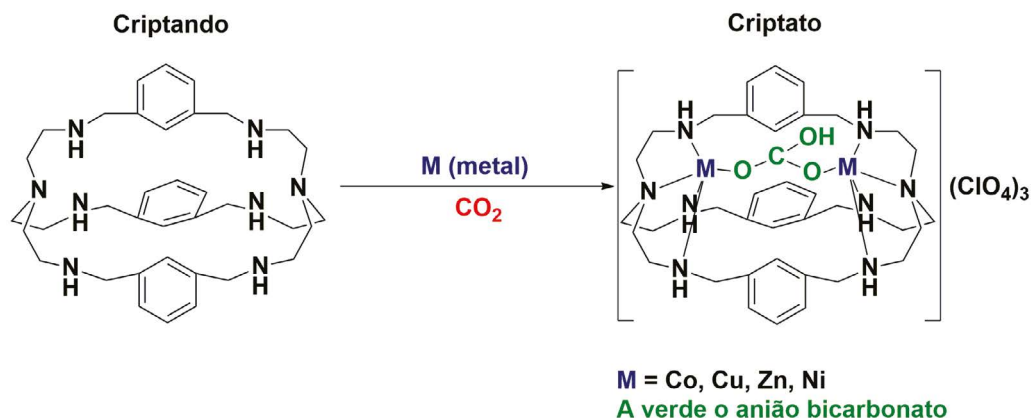


Figura 6 - Criptatos de Co estudados neste trabalho de doutoramento. Alterou-se o substituinte do anel aromático (R) por diferentes grupos químicos de forma a estudar a sua influência na captura e conversão de CO_2 [12].

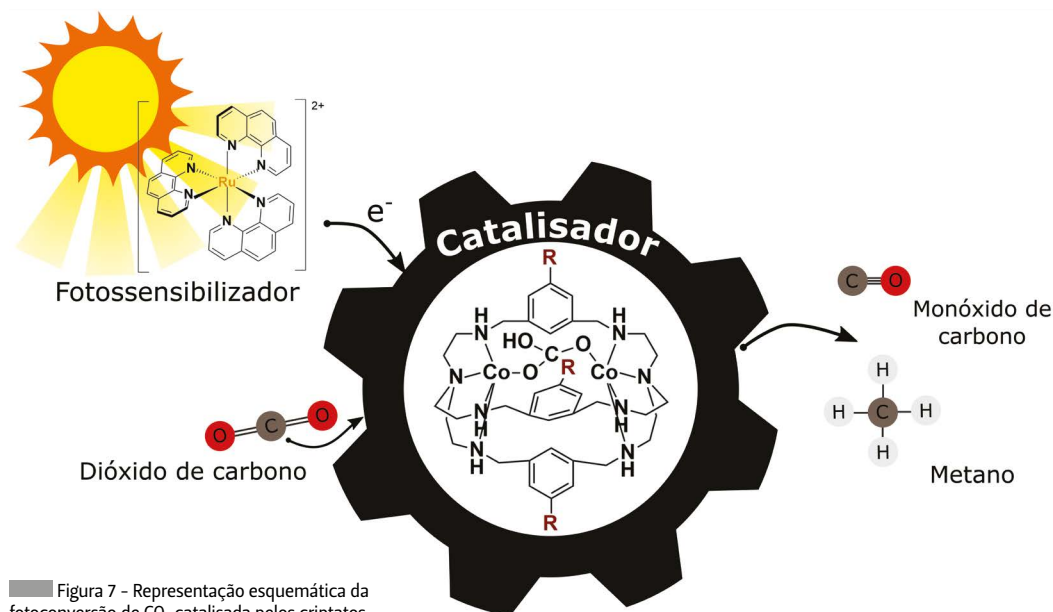
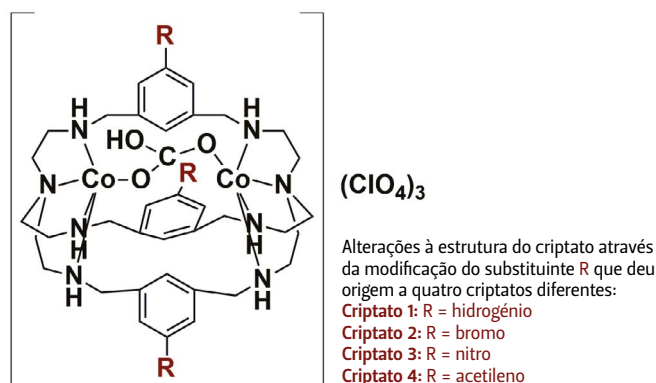


Figura 7 - Representação esquemática da fotoconversão de CO_2 catalisada pelos criptatos sintetizados no trabalho de doutoramento [12].

Assim, foram usados os criptatos da Figura 6 nas mesmas condições de fotoconversão de CO_2 utilizada pela equipa de Zhong e Lu e avaliado o seu potencial. Na Figura 7 está representada uma imagem explicativa do processo catalisado por luz visível. A reação foi realizada numa mistura de solvente orgânico e água, utilizando um composto de ruténio como fotossensibilizador (composto que recebe a luz e transfere eletrões para o catalisador) e trietanolamina como dador sacrificial de protões (Figura 7). A conversão de CO_2 não seria possível sem a presença do catalisador criptato, que se encontra na reação na concentração de 25 nanomolar, que corresponde a ter uma quantidade 1000 milhões de vezes mais pequena do que 1 miligrama dissolvidas em 1 mililitro! É um valor extremamente baixo comparativamente com outros catalisadores já utilizados nesta reação. Espantosamente, devido à modificação da estrutura dos criptatos conseguiu-se detetar não só CO, mas também CH_4 que pode ser utilizado diretamente pela sociedade sendo que é o componente maioritário do gás natural.

O trabalho realizado neste projeto deu origem a uma publicação que se tornou capa da revista *Chemistry: A European Journal* (Figura 8) e deu origem a várias entrevistas para a rádio e televisão devido à intensa discussão que tem existido sobre as alterações climáticas e o papel do CO_2 [14]. A equipa desfrutou deste



Figura 8 - Capa da revista *Chemistry: A European Journal* da editora Wiley-VCH [15].

contacto mais direto com a comunicação de ciência à sociedade, o que fez com que se queira empenhar ainda mais no desenvolvimento da ciência em Portugal.

Os resultados obtidos neste trabalho demonstram a importância da preparação de compostos de coordenação, neste caso criptatos, que são capazes de mimetizar processos existentes na natureza. Estes criptatos deram origem a um sistema sustentável que é ativado por luz visível para a conversão de CO₂ em CO e CH₄, que são produtos que podem ser usados como alternativa aos combustíveis fósseis. Como se de um ciclo energético viável se tratasse, usa-se um poluente para gerar moléculas que satisfazem as necessidades da sociedade que, após o seu consumo, geram novamente CO₂, que pode ser reconvertido. Este trabalho deu origem

a uma nova linha de investigação onde se pretende otimizar a estrutura destes criptatos para a produção apenas de CH₄, numa reação ativada pela luz visível.

Agradecimentos

Quero agradecer aos meus orientadores da tese de doutoramento, Doutor Paulo Martinho, Professora Maria José Calhorda e Professora Ana Margarida Martins, especialmente ao primeiro, pelo apoio demonstrado ao longo desta tese. Sem dúvida que o seu apoio contribuiu para os bons indicadores que resultaram desde trabalho do qual muito me orgulho. Quero agradecer também ao programa doutoral “Catálise e Sustentabilidade” (CATSUS) pela bolsa de doutoramento atribuída (PD/BD/52368/2013).

Referências

- [1] M. A. Scibioh, B. Viswanathan, “Carbon Dioxide to Chemicals and Fuels”, Elsevier, **2018**.
- [2] NASA, “Graphic: The relentless rise of carbon dioxide”: climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide (acedido em 03/02/2020).
- [3] M. Aresta, *Coord. Chem. Rev.* **2016**, *113*, 6621–6658. DOI: 10.1021/cr300463y.
- [4] C. Finn, S. Schnittger, L. J. Yellowlees, J. B. Love, *Chem. Comm.* **2012**, *48*, 1392–1399. DOI: 10.1039/C1CC15393E.
- [5] J. Schneider, H. Jia, J. T. Muckerman, E. Fujita, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 2036–2051. DOI: 10.1039/C1CS15278E.
- [6] H. Takeda, C. Cometto, O. Ishitani, M. Robert, *ACS Catal.* **2017**, *7*, 70–88. DOI: 10.1021/acscatal.6b02181.
- [7] J. M. Lehn, *Pure Appl. Chem.* **1978**, *50*, 871–892. DOI: 10.1351/pac197850090871.
- [8] Y. Dussart, C. Harding, P. Dalgaard, C. McKenzie, R. Kadirvelraj, V. McKee, J. Nelson, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **2002**, 1704–1713. DOI: 10.1039/B110449G.
- [9] C. T. Supuran, *Nat. Rev. Drug Discov.* **2008**, *7*, 168–181. DOI: 10.1038/nrd2467.
- [10] F. Möller, L. Castañeda-Losada, J. R. C. Junqueira, R. G. Miller, M. L. Reback, B. Mallick, M. van Gastel, U.-P. Apfel, *Dalton Trans.* **2017**, *46*, 5680–5688. DOI: 10.1039/C6DT04527H.
- [11] F. Möller, K. Merz, C. Herrmann, U.-P. Apfel, *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 904–907. DOI: 10.1039/C5DT04267D.
- [12] Sara Realista, *Sequestration and reduction of CO₂ using multifunctional metalorganic materials*. Tese de Doutoramento em Química. Universidade de Lisboa, **2018**. bibliotecas.utl.pt/cgi-bin/koha/opac-detail.pl?biblionumber=524827.
- [13] T. Ouyang, H. H. Huang, J. W. Wang, D. C. Zhong, T. B. Lu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 738–743. DOI: 10.1002/anie.201610607.
- [14] S. Realista, J. C. Almeida, S. A. Milheiro, N. A. G. Bandeira, L. G. Alves, F. Madeira, M. J. Calhorda, P. N. Martinho, *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 11670–11679. DOI: 10.1002/chem.201901806.
- [15] S. Realista, J. C. Almeida, S. A. Milheiro, N. A. G. Bandeira, L. G. Alves, F. Madeira, M. J. Calhorda, P. N. Martinho, *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 11583–11583. DOI: 10.1002/chem.201903441.

>

Sara Realista

Instituto de Tecnologia Química e Biológica António Xavier, ITQB NOVA, Universidade Nova de Lisboa, Oeiras, Portugal. Investigadora no projeto *Chemical Synthesis Using Earth-Abundant Metal Catalysts* no grupo de Catálise Organometálica liderado pela Dra. Beatriz Royo no Instituto de Tecnologia Química

e Biológica. Doutorou-se em 2018 e tem 13 artigos em revistas científicas internacionais e dois prémios nacionais. O seu principal interesse é a procura de novos compostos e metodologias para um mundo sustentável. sara.realista@itqb.unl.pt
ORCID.org/0000-0003-1066-1200

Gás Natural Sintético a partir de Dióxido de Carbono: Um “Challenge Accepted!” para os Zeólitos

> Maria C. Bacariza

Synthetic Natural Gas Production from Carbon Dioxide using Zeolites: Challenge Accepted! *The use of renewable sources for the production of electricity and their characteristic intermittency and unpredictability induces periods of overproduction. In this context, power-to-gas strategy allows using the surplus renewable energy to produce hydrogen through water electrolysis. This hydrogen could be then applied in the production of synthetic natural gas using carbon dioxide as raw material, a process with remarkable interest in the context of industrial sectors responsible for an important fraction of the global emissions of this greenhouse gas (e.g. cement industries). Thus, in this work zeolite-supported catalysts were systematically developed for application in CO₂ methanation reaction.*

O uso de fontes renováveis para a produção de eletricidade e a sua inerente intermitência e imprevisibilidade induz períodos de sobreprodução. Neste sentido, a estratégia “power-to-gas” permite utilizar o excesso pontual de eletricidade para a produção de hidrogénio através da eletrólise da água. Este hidrogénio poderá ser utilizado na produção de gás natural sintético a partir de dióxido de carbono, um processo especialmente importante no contexto de sectores industriais responsáveis por grandes emissões deste gás de efeito estufa, como as cimenteiras. Assim sendo, neste trabalho foram desenvolvidos de forma sistemática catalisadores para a metanação do CO₂ usando zeólitos como suportes.

Alterações climáticas e energias renováveis: uma oportunidade para o power-to-gas

O aumento progressivo das emissões de CO₂ tem motivado o estudo e desenvolvimento de estratégias para a sua redução e valorização, de forma a diminuir o seu impacto nas alterações climáticas [1].

Simultaneamente, o aumento da produção de energia elétrica em grande escala através de fontes renováveis, notável no caso de Portugal (Figura 1), e a sua inerente intermitência devido à imprevisibilidade das condições atmosféricas, tem motivado a procura de sistemas eficientes para o seu armazenamento [2].

Neste contexto, o *power-to-gas*, que tem vindo a ganhar relevância nos últimos anos [3], inclui a utilização da sobreprodução pontual de energia elétrica

de origem renovável na síntese do hidrogénio através da eletrólise da água. Este H₂ renovável poderá ser utilizado para a produção de metano, usando CO₂ como matéria-prima. Esta estratégia não só contribui para a redução global das emissões de CO₂, como também produz o principal componente do gás natural. Assim, o CH₄ produzido (gás natural sintético) poderá ser injetado na rede de distribuição de gás natural, reduzindo os custos de transporte e armazenamento, além de poder ser consumido nos próprios pontos de produção (e.g. cimenteiras). De facto, a hidrogenação do CO₂ a CH₄ tem sido, nos últimos anos, assunto de um grande número de publicações, existindo na atualidade algumas instalações piloto na Europa (e.g. *Jupiter 1000*, *Pegasus*) [4,5].

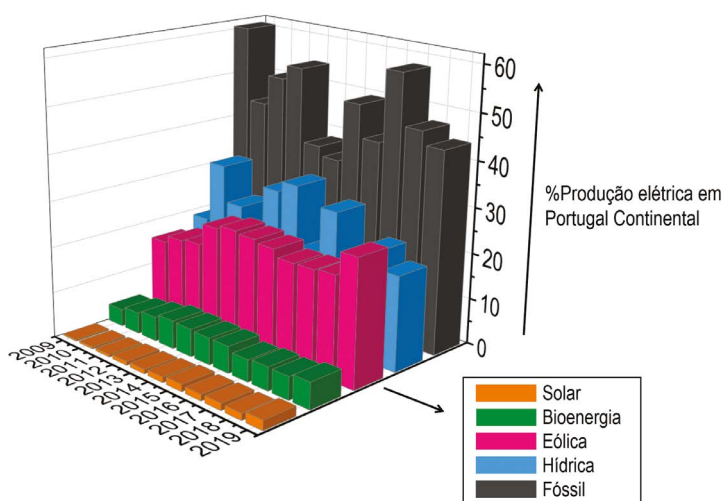
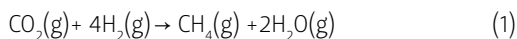


Figura 1 - Evolução da produção de energia por fonte em Portugal Continental (Fonte: REN).

A reação de Sabatier

A metanação do CO_2 (Eq. 1), descoberta por P. Sabatier em 1902, é um processo catalítico com diferentes aplicações, tendo até sido estudada pela NASA para a conversão de CO_2 de Marte a CH_4 e H_2O , com o fim de servir de combustível e como suporte para a vida dos astronautas [6].



Apesar de ser um processo termodinamicamente favorável, as consideráveis limitações cinéticas tornam necessário o uso de um catalisador que permita obter velocidades de reação aceitáveis. Assim, foram publicados numerosos estudos incluindo não só a metanação catalítica por via térmica convencional, mas também por fotocatalise, eletrocatalise ou até catalise assistida por plasma [7–11]. O principal metal ativo é o Ni, embora tenham sido estudados catalisadores à base de metais nobres, como o Rh e o Ru [7,8,12–15]. Relativamente aos suportes, o mais usado é Al_2O_3 . Contudo, outros materiais como SiO_2 , CeO_2 , ZrO_2 , mesoporosos ou zeólitos têm sido também referidos como interessantes [7,8,12–15]. Entre eles, os zeólitos são candidatos promissores, principalmente devido às suas propriedades facilmente reguláveis.

Zeólitos e metanação: um par com futuro

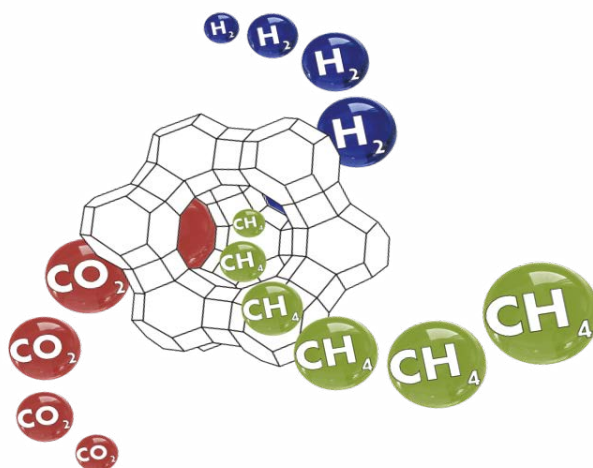
Os zeólitos, descobertos em 1756 pelo mineralogista sueco A. F. Crönstedt, são aluminossilicatos cristalinos com múltiplas aplicações. Apesar de, inicialmente, terem sido usados na sua forma natural em joalheria, anos mais tarde os primeiros zeólitos sintéticos (X, Y e A) seriam utilizados industrialmente como adsorventes

(e.g. secagem do gás natural), permutadores iónicos (e.g. detergentes em pó) ou até, de forma significativa, como catalisadores heterogêneos em refinação ou catálise ambiental [16].

Existem diferentes tipos de zeólitos, estando todos eles compilados no *Atlas of Zeolite Framework Types* realizado pela *International Zeolite Association* (IZA). Apresentam estruturas 2D/3D que resultam da composição de tetraedros TO_4 ($T = \text{Si}, \text{Al}$) interligados através dos oxigénios em ponte. Os tetraedros AlO_4^- induzem a existência de cargas negativas na estrutura, que são neutralizadas por cátions de compensação permutáveis, tais como o Na^+ ou o H^+ [16]. Para além do alto grau de cristalinidade, as diferentes morfologias das cristalites, as propriedades de adsorção ou a natureza, localização e força dos centros ativos, os zeólitos caracterizam-se pela sua seletividade de forma, o que os torna interessantes para aplicações em adsorção e catálise.

Tendo em conta a facilidade com que as propriedades destes materiais podem ser reguladas através da manipulação da razão Si/Al, da natureza dos cátions ou até pelas estruturas diferentes, eles constituem suportes com potencial para aplicação na metanação do CO_2 , podendo ser fundamentais para identificar relações estrutura-reatividade. Como ponto de partida para um estudo mais aprofundado e devido à água formada na reação poder eventualmente danificar a estrutura dos zeólitos, o USY (Figura 2) apresenta-se como um candidato oportuno pela sua resistência hidrotérmica, conseguida em resultado de um processo de desaluminação controlada por tratamento de *steaming* do zeólito Y após síntese [17]. Além disso, devido a questões de custo-eficiência, o uso do Ni como metal ativo será, para já, mais conveniente.

Figura 2 - Representação dum zeólito USY para a reação de Sabatier.



Os primeiros passos: otimizar as condições de preparação

Identificar as condições ótimas de preparação de catalisadores Ni/Zeólito constitui uma fase inicial fundamental para a realização de um estudo sistemático neste tópico.

Por conseguinte, foram preparados dois catalisadores 2%Ni/USY com o Ni incorporado por permuta iónica e impregnação a seco, tendo-se verificado que a impregnação favorece a presença de NiO enquanto que a permuta, como expectável, conduz à incorporação de Ni²⁺. Este efeito reflete-se numa maior facilidade de redução do NiO a Ni⁰ (fase ativa) durante o pré-tratamento de redução que antecede os testes catalíticos (1 h a 470 °C sob fluxo de H₂), efetuados à temperatura de 250-450 °C, sob fluxo de H₂/CO₂/N₂ = 4:1:1 e com GHSV (do inglês *Gas Hourly Space Velocity*) constante. A impregnação conduz então à formação de um número muito superior de centros ativos disponíveis para a reação e, portanto, a um rendimento superior em CH₄ (Figura 3) [18].

No que diz respeito ao teor de Ni, verificou-se que 15% será o mais apropriado (Figura 3), o que se pode

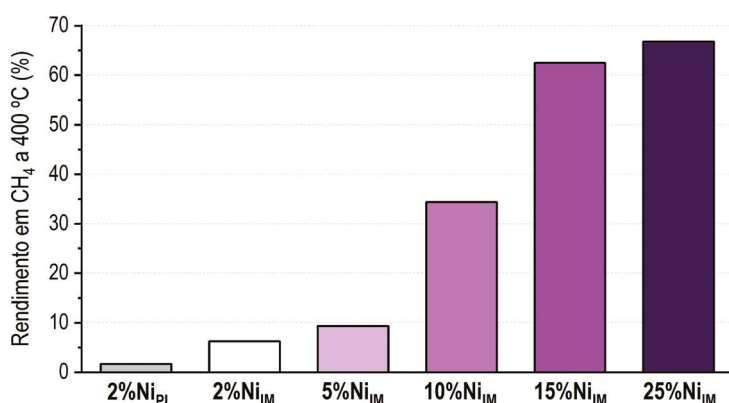


Figura 3 - Rendimentos em CH₄ (%) a 400 °C para catalisadores Ni/USY com % de Ni de 2-25%, preparados por permuta iónica (PI) e impregnação a seco (IM).

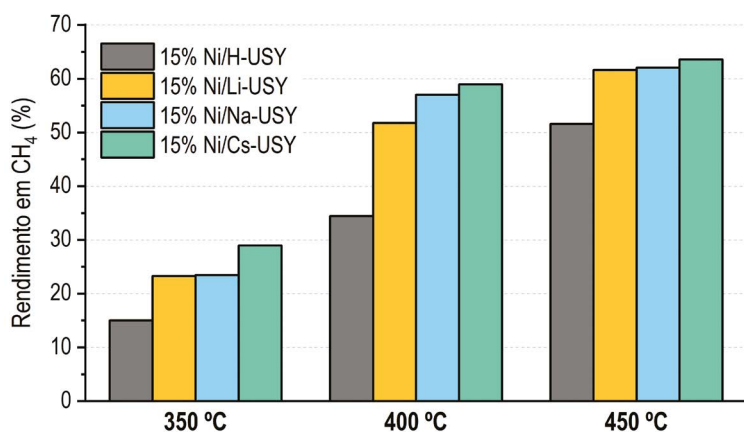


Figura 4 - Rendimentos em CH₄ (%) a 350-450 °C para catalisadores 15%Ni/USY com diferentes catiões de compensação.

explicar pelo diâmetro médio das partículas de Ni⁰ não ter sido afetado substancialmente na gama de teores de 5-15% (≈ 20 nm) [18]. No caso da preparação com 25% de Ni, devido à ocorrência de processos de sinterização, formam-se partículas de maiores dimensões (≈ 30 nm), atenuando o efeito do aumento da quantidade total de Ni. Por último, as variações nas temperaturas de calcinação e pré-redução não conduziram a alterações substanciais no desempenho catalítico [19].

Aprofundamento da compreensão: o efeito da composição da estrutura e do tipo de zeólito

Considerando os efeitos da modificação do catião de compensação, da razão Si/Al ou do tipo de estrutura nas propriedades dos zeólitos [16], torna-se fundamental compreender qual o impacto destes fatores na atividade de catalisadores Ni/Zeólito, sintetizados usando as condições previamente otimizadas, para a metanação do CO₂.

Catiões de compensação. Verificou-se que catiões de maior dimensão promovem a redutibilidade do NiO, favorecem sistematicamente a basicidade da estrutura do zeólito, melhorando a interação com o CO₂ e a sua ativação, e aumentam a hidrofobicidade. De facto, a água tem um efeito inibitório na reação de Sabatier devido à reversibilidade da mesma e, mais significativamente, pela sua adsorção nos mesmos centros ativos onde o CO₂ adsorve. Assim, catalisadores cuja interação com a H₂O seja mais fraca deverão apresentar um efeito inibitório menos pronunciado na catálise. De facto, observou-se que as amostras contendo catiões como o Na⁺ ou o Cs⁺ apresentaram propriedades mais interessantes em termos catalíticos do que a forma ácida (Figura 4), sendo a ordem do rendimento em CH₄ seguida pelos catalisadores coincidente com a variação da hidrofobicidade, da redutibilidade e da basicidade (Cs⁺ > Na⁺ > Li⁺ >> H⁺) [20].

Razão Si/Al. Complementarmente, o aumento da razão Si/Al leva a uma maior hidrofobicidade e à formação de cavidades mesoporosas, devido ao processo de preparação seguido para estes suportes comerciais, onde algumas partículas de NiO/Ni⁰ estarão localizadas com interações metal-suporte mais fortes. Contudo, um parâmetro tipicamente assinalado quer na literatura quer neste trabalho como favorável para esta reação, a basicidade, variou inversamente com a razão Si/Al. Em termos catalíticos, o aumento da razão Si/Al induz, independentemente do catião, melhorias significativas (Figura 5). Isto será devido à variação da afinidade das estruturas pela água e à consequente redução do efeito inibitório da mesma na reação, tendo esta propriedade um impacto mais significativo na atividade do que a basicidade intrínseca dos zeólitos [21].

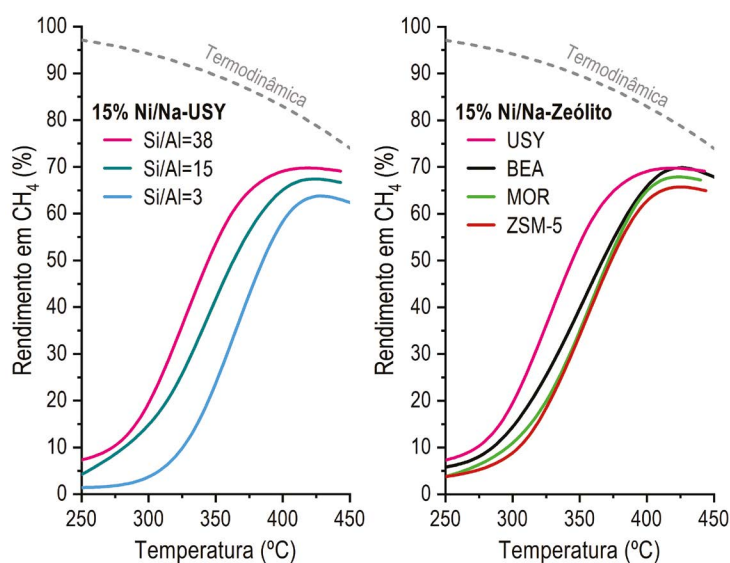


Figura 5 - Rendimentos em CH₄ (%) para catalisadores 15%Ni/Zeólito com Si/Al variáveis (esquerda) e estruturas diferentes (direita).

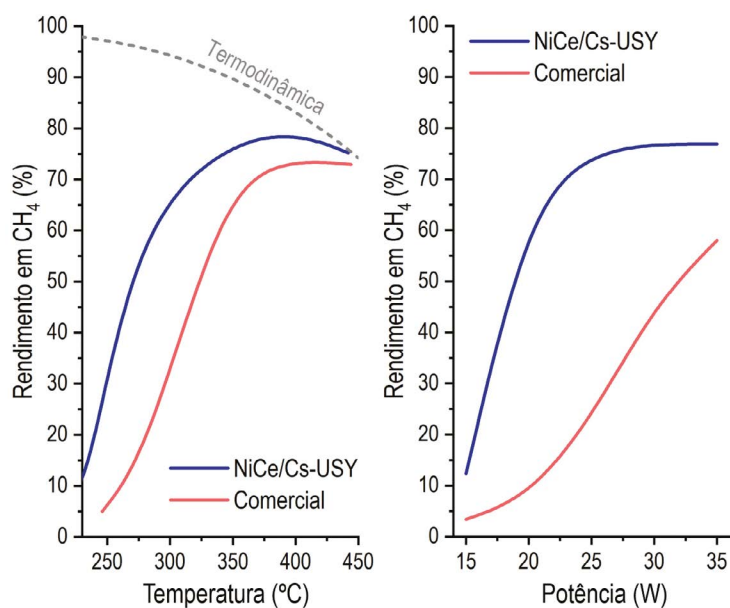


Figura 6 - Rendimentos em CH₄ (%) para o catalisador 15%Ni-20%Ce/Cs-USY(38) e para o comercial Ni/ γ -Al₂O₃, ambos testados sobre as mesmas condições em catálise térmica (esquerda) e assistida por plasma DBD (direita).

Tipo de estrutura. Como observado com a razão Si/Al, o efeito das estruturas foi consistente independentemente do tipo de catião. Neste sentido, verificou-se que o maior caráter hidrofóbico do USY está na origem do seu rendimento superior (Figura 5). Além disso, a melhoria na dispersão do Ni⁰ e a presença de cavidades atuando como mesoporos no BEA, justifica os resultados ligeiramente inferiores aos do USY. Relativamente ao ZSM-5 e MOR, ambos apresentaram espécies NiO/Ni⁰ com interações metal-suporte fracas e resultados catalíticos semelhantes entre si, mas inferiores aos do USY e BEA [22].

Resumo dos efeitos observados. Destes estudos conclui-se que a hidrofobicidade/hidroflicidade dos zeólitos, consideravelmente regulável, é uma propriedade com efeitos notáveis na reação de Sabatier, atingindo um impacto superior ao da basicidade dos suportes. Por outro lado, foi sugerido que o uso de zeólitos com cavidades mesoporosas melhora a interação metal-suporte e poderá também ser relevante para efeitos de confinamento de partículas, podendo estar na origem de alguns resultados catalíticos interessantes. Contudo, o catalisador com 15% de Ni sobre o zeólito Cs-USY(38) foi o mais promissor [23].

Impulsionar o rendimento dos Ni/Zeólitos: incorporação de promotores

Tendo sido claramente referido na literatura que a incorporação de óxidos não estequiométricos ou básicos pode induzir um incremento na atividade de catalisadores de Ni suportados para a metanação do CO₂, foram realizados estudos de otimização para a incorporação de Ce e Mg em catalisadores Ni/USY [18,24]. Verificou-se que o Ce, especialmente quando co-impregnado com o Ni, consegue melhorar substancialmente a redutibilidade do NiO, a ativação do CO₂ e ainda a dispersão do Ni⁰.

Portanto, com o objetivo de impulsionar o rendimento em CH₄, preparou-se um catalisador com 15% de Ni e 20% de Ce usando o Cs-USY(38) como suporte. Este catalisador apresentou partículas de Ni⁰ com diâmetros inferiores a 3 nm e rendimentos em CH₄ muito superiores aos obtidos, sob as mesmas condições de catálise térmica ou assistida por plasma DBD (do inglês *Dielectric Barrier Discharge*), para um catalisador comercial de Ni/ γ -Al₂O₃ (Figura 6) [25,26].

E agora? O futuro dos zeólitos na metanação do CO₂

Como demonstrado, os zeólitos têm-se revelado vantajosos na identificação de relações estrutura-reatividade difíceis de avaliar através do uso de outros materiais cujas propriedades não podem ser reguladas de um modo tão sistemático, permitindo também a preparação de catalisadores Ni/Zeólito com propriedades interessantes na metanação [23].

De facto, a sua estabilidade hidrotérmica e a facilidade para regular a afinidade pelo CO₂ e a H₂O, assim como a dispersão metálica foram identificadas como propriedades cruciais para a obtenção de rendimentos em CH₄ elevados na metanação catalítica do CO₂ por via térmica e assistida por plasma (Figura 7) [23].

Contudo, a aplicação destes materiais em condições tais como a conversão dos gases provenientes de efluentes de cimenteiras ou o *upgrading* do biogás, encerra ainda um desafio com várias barreiras a ultrapassar. A presença de O₂ ou vapor de água nestes efluentes é alegadamente responsável por importantes perdas de atividade em

catalisadores à base de Ni. Neste sentido, o futuro dos zeólitos na metanação do CO₂ deverá passar pela avaliação e otimização da utilização de outros metais ativos com elevada resistência à reoxidação e à sinterização.

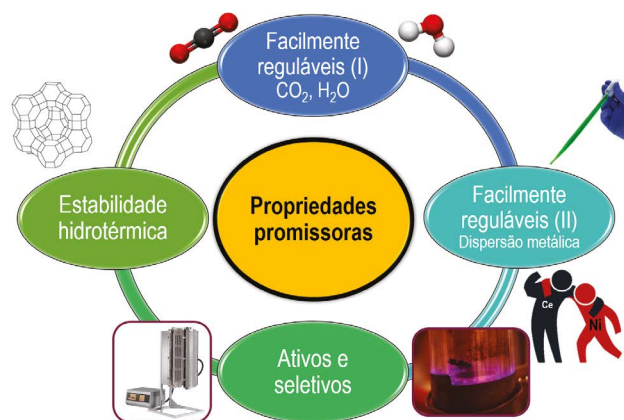


Figura 7 - Principais vantagens do uso de zeólitos na metanação do CO₂.

Conclusões

Este trabalho constitui um importante avanço na utilização de catalisadores zeolíticos no processo do *power-to-gas* para a produção de gás natural sintético a partir de CO₂, tendo sido identificadas, através dum estudo rigoroso e sistemático, as condições mais interessantes para a incorporação de Ni e promotores assim como as características da composição da estrutura capazes de melhorar os rendimentos na reação de metanação do CO₂. Contudo, serão necessários outros estudos, relativos à incorporação de metais resistentes à reoxidação nos zeólitos, para aplicação destes catalisadores em algumas condições reais específicas.

Agradecimentos

Aos meus orientadores de doutoramento, Prof. José Madeira Lopes e Prof. Carlos Henriques, à Dr.^a Inês Graça e a todos os que contribuíram para este trabalho. À FCT pela bolsa de doutoramento (SFRK/BD/52369/2013) e ao CEOPS-FP7.

Referências

- [1] A. Rafiee, K. R. Khalilpour, D. Milani, M. Panahi, *J. Environ. Chem. Eng.* **2018**, 6, 5771–5794. DOI: 10.1016/j.jece.2018.08.065.
- [2] T. Weitzel, C. H. Glock, *Eur. J. Oper. Res.* **2018**, 264, 582–606. DOI: 10.1016/j.ejor.2017.06.052.
- [3] M. Thema, F. Bauer, M. Sterner, *Renew. Sust. Energ. Rev.* **2019**, 112, 775–787. DOI: 10.1016/j.rser.2019.06.030.
- [4] C. Wulf, J. Linßen, P. Zapp, *Energy Procedia* **2018**, 155, 367–378. DOI: 10.1016/j.egypro.2018.11.041.
- [5] C. V. Miguel, A. Mendes, L. M. Madeira, *Energies* **2018**, 11, 3259. DOI: 10.3390/en1123259.
- [6] W. Wei, G. Jinlong, *Front. Chem. Sci. Eng.* **2010**, 5, 2–10. DOI: 10.1007/s11705-010-0528-3.
- [7] W. Jin Lee, C. Li, H. Prajitno, J. Yoo, J. Patel, Y. Yang, S. Lim, *Catal. Today* **2020**, 368, 2–19. DOI: 10.1016/j.cattod.2020.02.017.
- [8] J. Ashok, S. Pati, P. Hongmanorom, Z. Tianxi, C. Junmei, S. Kawi, *Catal. Today* **2020**, 356, 471–489. DOI: 10.1016/j.cattod.2020.07.023.
- [9] R. Dębek, F. Azzolina-Jury, A. Travert, F. Maugé, *Renew. Sust. Energ. Rev.* **2019**, 116, 109427. DOI: 10.1016/j.rser.2019.109427.
- [10] C. V. Miguel, M. A. Soria, A. Mendes, L. M. Madeira, *Chem. Eng. J.* **2017**, 322, 590–602. DOI: 10.1016/j.cej.2017.04.024.
- [11] A. C. Faria, C. V. Miguel, A. E. Rodrigues, L. M. Madeira, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2020**, 59, 16170–16184. DOI: 10.1021/acs.iecr.0c02860.
- [12] C. V. Miguel, A. Mendes, L. M. Madeira, *J. CO₂ Util.* **2018**, 25, 128–136. DOI: 10.1016/j.jcou.2018.03.011.
- [13] A. C. Faria, C. V. Miguel, L. M. Madeira, *J. CO₂ Util.* **2018**, 26, 271–280. DOI: 10.1016/j.jcou.2018.05.005.
- [14] S. Das, J. Pérez-Ramírez, J. Gong, N. Dewangan, K. Hidajat, B. C. Gates, S. Kawi, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, 49, 2937–3004. DOI: 10.1039/C9CS00713J.
- [15] J. A. Martins, A. C. Faria, M. A. Soria, C. V. Miguel, A. E. Rodrigues, L. M. Madeira, *Catalysts* **2019**, 9, 1008. DOI: 10.3390/catal9121008.
- [16] M. Guisnet, F. Ramôa Ribeiro, "Zeólitos. Um nanomundo ao serviço da catálise", Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, **2014**.
- [17] G. Busca, *Micropor. Mesopor. Mat.* **2017**, 254, 3–16. DOI: 10.1016/j.micromeso.2017.04.007.
- [18] I. Graça, L. V. González, M. C. Bacariza, A. Fernandes, C. Henriques, J. M. Lopes, M. F. Ribeiro, *Appl. Catal. B Environ.* **2014**, 147, 101–110. DOI: 10.1016/j.apcatb.2013.08.010.
- [19] M. C. Bacariza, I. Graça, A. Westermann, M. F. Ribeiro, J. M. Lopes, C. Henriques, *Top. Catal.* **2015**, 59, 314–325. DOI: 10.1007/s11244-015-0435-4.
- [20] M. C. Bacariza, R. Bértolo, I. Graça, J. M. Lopes, C. Henriques, *J. CO₂ Util.* **2017**, 21, 280–291. DOI: 10.1016/j.jcou.2017.07.020.
- [21] M. C. Bacariza, I. Graça, J. M. Lopes, C. Henriques, *Micropor. Mesopor. Mat.* **2018**, 267, 9–19. DOI: 10.1016/j.micromeso.2018.03.010.
- [22] M. C. Bacariza, M. Maleval, I. Graça, J. M. Lopes, C. Henriques, *Micropor. Mesopor. Mat.* **2019**, 274, 102–112. DOI: 10.1016/j.micromeso.2018.07.037.
- [23] M. C. Bacariza, I. Graça, J. M. Lopes, C. Henriques, *ChemCatChem* **2019**, 11, 2388–2400. DOI: 10.1002/cctc.201900229.
- [24] M. C. Bacariza, I. Graça, S. S. Bebiano, J. M. Lopes, C. Henriques, *Energy Fuels* **2017**, 31, 9776–9789. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7b01553.
- [25] M. C. Bacariza, I. Graça, J. M. Lopes, C. Henriques, *ChemCatChem* **2018**, 10, 2773–2781. DOI: 10.1002/cctc.201800204.
- [26] M. C. Bacariza, M. Biset-Peiró, I. Graça, J. Guilera, J. Morante, J. M. Lopes, T. Andreu, C. Henriques, *J. CO₂ Util.* **2018**, 26, 202–211. DOI: 10.1016/j.jcou.2018.05.013.

>

Maria C. Bacariza

C5Lab - Sustainable Construction Materials Association.

Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa. Doutorada em Engenharia Química pela Universidade de Lisboa (2018), é atualmente investigadora do C⁵Lab (Sustainable Construction Materials Association) e

pertence ao Centro de Química Estrutural (Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa). Com elevada motivação para a catálise ambiental, desenvolve o seu trabalho de investigação na área da valorização do CO₂ para a produção de metano. maria.rey@tecnico.ulisboa.pt
ORCID.org/0000-0003-4236-6724

Dióxido de Carbono Supercrítico: Uma Alternativa para uma Síntese Mais Sustentável

>
Rita F. Pires

Supercritical Carbon Dioxide: A Sustainable Alternative in Synthesis. *In addition to being thermodynamically stable, chemically inert under many conditions, non-toxic and non-flammable, carbon dioxide has unique properties that make it very suitable to be used as a supercritical fluid. During the past few years, several reactions have been explored using the properties of supercritical CO₂ (scCO₂). In this article, not only the advantages of using scCO₂ will be presented, but also some reactions where scCO₂ has been explored as sustainable alternative synthetic route.*

Para além de termodinamicamente estável, quimicamente inerte sob muitas condições, não ser tóxico nem inflamável, o dióxido de carbono possui propriedades muito particulares de solvatação, tornando o seu uso como fluido supercrítico muito interessante. Ao longo dos anos diversas reações químicas têm sido exploradas usando o dióxido de carbono supercrítico (scCO₂). Neste artigo são apresentadas não só as vantagens do uso do scCO₂, mas também algumas reações onde o seu uso tem sido explorado como via sintética alternativa mais sustentável.

Introdução

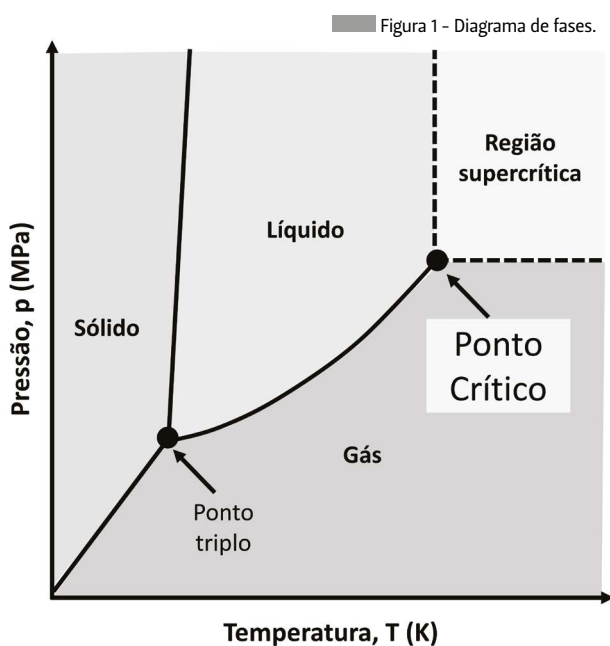
Hoje em dia, a procura de um modo de vida mais sustentável é uma das preocupações da sociedade atual, tendo sido definido como um dos principais objetivos da Agenda 2030 promovida pelas Nações Unidas. É por isso imperativo que se adotem novas metodologias que se enquadrem neste novo paradigma, também na investigação [1]. Ao longo dos últimos anos tem-se observado um esforço por parte da comunidade científica em criar novas metodologias que não envolvam matérias-primas e/ou solventes de elevada toxicidade e a implementação de novas tecnologias que permitam, não só reduzir os tempos de reação, a quantidade de solventes usados, o uso de temperaturas elevadas, mas também a quantidade de produtos secundários formados, reduzindo assim os processos de purificação e o tratamento de resíduos.

Dióxido de carbono supercrítico (scCO₂)

Diferentes tecnologias (como por exemplo as micro-ondas, ou ultrassons, ou a mecanoquímica) têm sido usadas como fontes de energia alternativas, permitindo por exemplo a redução do tempo de reação ou a quantidade de solventes usados. No caso da tecnologia supercrítica, a sustentabilidade dos processos químicos aumenta, uma vez que não só existe a possibilidade de diminuição dos tempos de reação, como também são utilizados solventes Verdes com propriedades únicas, que podem ser reciclados e reutilizados novamente.

Por definição, um fluido supercrítico é qualquer substância pura que a uma determinada pressão e temperatura acima do seu ponto crítico (Figura 1) já não tem um equilíbrio líquido-vapor, contudo continua a apresentar propriedades de difusão semelhantes às do composto no estado gasoso e de viscosidade e densidade similares às daquelas apresentadas no estado

líquido, aumentando a sua capacidade de transporte de massa e coeficiente de difusão em comparação com as condições normais nas fases gasosa e líquida [2]. Existem diversos compostos, como por exemplo a água, o metanol, o etanol, o propano ou a acetona que podem ser usados como fluidos supercríticos. No entanto, estes compostos por vezes apresentam ou uma pressão crítica (p_c) e/ou temperatura crítica (T_c) elevada, tornando o seu uso na tecnologia supercrítica menos vantajoso. Por outro lado, o dióxido de carbono (CO_2) para além de ser um composto relativamente barato (subproduto da indústria), tem um ponto crítico relativamente acessível (7,38 MPa e 304,1 K), o qual, aliado ao facto de ser termodinamicamente estável, quimicamente inerte sob muitas condições, não ser tóxico nem inflamável, e com propriedades de solvatação muito particulares, faz com que o CO_2 seja um dos compostos mais utilizados na tecnologia supercrítica [3-5].



Aplicações industriais do scCO_2

A nível industrial, o dióxido de carbono supercrítico é bastante usado em processos de extração e purificação [6], tais como a descafeinação dos grãos de café [7], a extração de produtos naturais (óleos essenciais, fragrâncias ou compostos medicinais de plantas [8]) e processos de extração de vitaminas, gorduras ou colestero de alguns alimentos como a carne e o leite [2,9]. Na indústria têxtil [10] o scCO_2 é bastante utilizado em processos como o tingimento, enquanto na indústria farmacêutica o enorme potencial desta técnica tem sido explorado no *design* de novos compostos para entrega e transporte de fármacos [11].

Vantagens do CO_2

Apesar de ser uma metodologia já implementada na indústria, a tecnologia supercrítica ainda tem muito potencial a ser explorado, continuando por isso a despertar interesse junto da comunidade científica. Isto porque o CO_2 é um solvente particularmente interessante na síntese de materiais, pois apesar de ser um solvente apolar tem um grande momento quadrupolo, bem como uma ligação polar C=O que confere ao scCO_2 a capacidade de solubilizar vários compostos que contenham grupos hidroxilo, carbonilo ou flúor na sua composição. Para além disso, a sua capacidade de formar emulsões com a água e ser miscível com alguns solventes como por exemplo o metanol, a acetona, o isopropanol, o hexano, o ácido acético ou o etanol, permitem que estes sejam usados como co-solventes promovendo a solubilização dos reagentes. Mais ainda, a capacidade de se poder usar o CO_2 como anti-solvente, permite por exemplo a extração de solventes para produção de estruturas tridimensionais ou membranas [3,4].

O facto do CO_2 poder ser facilmente removido das estruturas formadas, permite não só uma difusão melhor dos reagentes pelas estruturas porosas (melhorando processos como a impregnação de fármacos [12]), como também um aumento da área superficial, uma distribuição mais homogênea e menos aglomeração dos produtos formados, em comparação com aqueles que são produzidos por vias tradicionais. Neste sentido, o seu uso tem vindo a tornar-se cada vez mais apelativo em diferentes processos como a formação de aerogéis 3D, o revestimento de superfícies, processos de extração, ou processos de esfoliação de superfícies, como a esfoliação da grafite [4].

No caso particular da síntese de nanopartículas, especialmente nanopartículas metálicas, a capacidade extraordinária do CO_2 em conseguir penetrar e difundir-se por entre os poros dos materiais de partida, possibilita a deposição de nanopartículas com uma elevada dispersividade e controlo das propriedades morfológicas (ex. porosidade, densidade), algo que através das vias convencionais é muito difícil de conseguir controlar, garantindo uma boa reprodutibilidade [13-15].

scCO_2 na síntese química

Para além do processamento de materiais, o potencial da tecnologia supercrítica usando o CO_2 tem sido também explorado em diversas reações químicas, entre as quais, reações de catálise heterogênea, hidrogenações, oxidações e reações enantioselectivas [16].

A hidrogenação do ácido levulínico **1** (Figura 2A) é um excelente exemplo de como esta tecnologia permite realizar não só a hidrogenação, mas também a purificação do produto final, a lactona **2**, apenas manipulando a capacidade de solvatação do CO_2

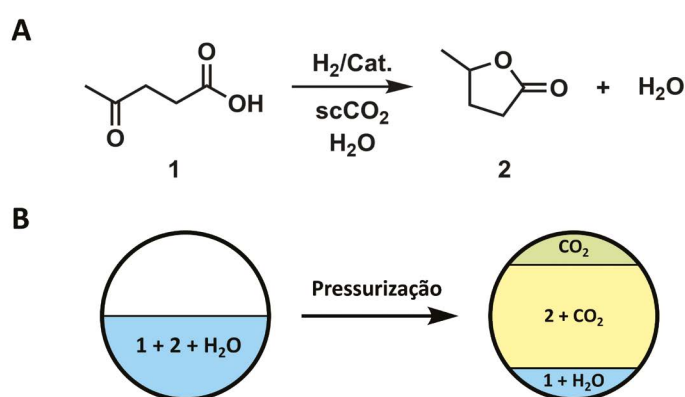


Figura 2 - Esquema reacional da reação de hidrogenação do ácido levulínico 1 para obtenção da lactona 2 (A) e representação da separação de fases que ocorre quando há uma pressurização do reator com o dióxido de carbono (B). Adaptado da referência [17].

expandido e a sua miscibilidade com a água. Isto é possível uma vez que, com a pressurização do CO_2 , apenas o produto ficará solúvel, enquanto o material de partida apenas é solúvel em água (Figura 2B). Deste modo, operando em processo contínuo é possível recolher separadamente a fase que contém o produto enquanto a fase aquosa contendo o material de partida continua a reagir continuamente no reator, evitando assim não só processos adicionais de purificação, mas também desperdício dos materiais de partida [17].

A possibilidade de poder usar a mesma técnica não só no processamento dos materiais de partida como na reação química onde estes vão ser utilizados torna esta técnica ainda mais interessante. Morère *et al.* [18] combinaram a deposição de nanopartículas de platina, ruténio e níquel em nanocompósitos de grafeno oxidado usando o scCO_2 , com o objetivo de preparar catalisadores seletivos para a hidrogenação parcial do limoneno. Deste modo, foi possível obter bons resultados relativamente à percentagem de seletividade (ca. 90%) e de conversão (ca. 80%) do limoneno, evitando alguns constrangimentos que poderiam ocorrer pela via clássica, como a desagregação das nanopartículas e do grafeno ou a reorganização das folhas de grafeno, uma vez que o processo de esfoliação e deposição das nanopartículas nos nanocompósitos pela via clássica é irregular, como também alguns problemas de viscosidade e difusão.

Polimerização em scCO_2

A síntese de polímeros em scCO_2 traz inúmeras vantagens uma vez que o CO_2 é um solvente aprótico e tem uma elevada capacidade de transferência de massa e difusividade, dificilmente alcançadas usando solventes orgânicos. Deste modo, os polímeros podem ser obtidos através de uma simples despressurização, resultando em processos com menor toxicidade

associada e custos de produção mais baixos [19].

Para além disso, o uso do scCO_2 pode induzir a plastificação ou fusão dos polímeros (homopolímeros, copolímeros e misturas de polímeros) a uma temperatura muito mais baixa do que as suas temperaturas de transição vítrea (T_g) e fusão (T_m), o que tem um forte impacto nas propriedades mecânicas e termofísicas [20,21]. Por outro lado, o scCO_2 permite uma purificação muito mais fácil e sustentável dos polímeros, comparativamente à via clássica, um maior controlo do tamanho das cadeias do polímero e a diminuição da formação de aglomerados. Por estas razões, o scCO_2 tem sido explorado na síntese de diversos tipos de polímeros, lineares, reticulados e ramificados, recorrendo a diferentes estratégias de polimerização, como por exemplo a polimerização por abertura de anel [22-32].

Para além das vantagens já descritas, em 2012 Restani *et al.* [26] descreveram a síntese de dendrímeros de poliureia (PURE), onde o CO_2 é usado estrategicamente como solvente e como reagente, permitindo a introdução de grupos ureia nas cadeias do polímero, formados a partir da captura do CO_2 pelas aminas do monómero de partida. Esta metodologia, para além de usar o CO_2 como fonte de carbono (C1 *feedstock*) elimina o uso de isocianatos como materiais de partida (precursores altamente tóxicos), os quais eram até aqui a única alternativa possível para a síntese deste tipo de polímeros. Para além disso, os autores simplificaram os processos de síntese (apenas dois passos reacionais) e de purificação deste tipo de polímeros, uma vez que com a despressurização o scCO_2 remove os materiais de partida que não reagiram e os produtos secundários formados no primeiro passo reacional, sendo apenas necessário realizar uma diálise com água destilada no final da polimerização, tornando o processo muito mais sustentável.

Conclusões

A versatilidade do dióxido de carbono supercrítico tem permitido a sua exploração em diferentes áreas da química, com especial destaque na ciência dos materiais. O poder solvente do scCO_2 , para além de possibilitar uma drástica redução do uso de solventes orgânicos, altamente prejudiciais ao ambiente, permite

igualmente a obtenção de materiais com propriedades muito interessantes, não observadas usando as vias sintéticas ou de processamento convencionais. O facto do CO_2 ser um subproduto industrial, facilmente acessível, torna-o ainda mais atrativo como parte de estratégias de síntese e processamento de materiais mais sustentáveis.

Referências

- [1] Agenda 2030 para o desenvolvimento sustentável das Nações Unidas: un.org/sustainabledevelopment/development-agenda (acedido em abril de 2021).
- [2] J. Hu, W. Deng, *J. Cleaner Prod.* **2016**, *113*, 931–946. DOI: 10.1016/j.jclepro.2015.10.104.
- [3] J. Peach, J. Eastoe, *Beilstein J. Org. Chem.* **2014**, *10*, 1878–1895. DOI: 10.3762/bjoc.10.196.
- [4] X. Zhang, S. Heinonen, E. Levänen, *RSC Adv.* **2014**, *4*, 61137–61152. DOI: 10.1039/C4RA10662H.
- [5] S. Marre, C. Aymonier, *Preparation of Nanomaterials in Flow at Supercritical Conditions from Coordination Complexes in T. Noël* (ed.), "Organometallic Flow Chemistry, Topics in Organometallic Chemistry", Springer, **2016**.
- [6] S. D. Manjare, K. Dhingra, *Mater. Sci. Energy Technol.* **2019**, *2*, 463–484. DOI: 10.1016/j.mset.2019.04.005.
- [7] X. Han, M. Poliakoff, *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 1428–1436. DOI: 10.1039/C2CS15314A.
- [8] W. K. Modey, D. A. Mulholland, M. W. Raynor, *Phytochem. Anal.* **1996**, *7*, 1–15. DOI: 10.1002/(SICI)1099-1565(199601)7:1<1::AID-PCA275>3.0.CO;2-U.
- [9] N. L. Rozzi, R. K. Singh, *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* **2002**, *1*, 33–44. DOI: 10.1111/j.1541-4337.2002.tb00005.x.
- [10] A. N. Amenaghawon, C. L. Anyalewechi, H. S. Kusuma, M. Mahfud, *Chapter 13 - Applications of supercritical carbon dioxide in textile industry in Inamuddin, A. M. Asiri, A. M. Isloor* (eds.), "Green sustainable process for chemical and environmental engineering and science", Elsevier, **2020**.
- [11] A. Taberner, E. M. M. del Valle, M. A. Galán, *Chem. Eng. Process.* **2012**, *60*, 9–25. DOI: 10.1016/j.cep.2012.06.004.
- [12] R. B. Restani, J. Conde, R. F. Pires, P. Martins, A. R. Fernandes, P. V. Baptista, V. D. B. Bonifácio, A. Aguiar-Ricardo, *Macromol. Biosci.* **2015**, *15*, 1045–1051. DOI: 10.1002/mabi.201500131.
- [13] P. G. Jamkhande, N. W. Ghule, A. H. Bamer, M. G. Kalaskar, *J. Drug Delivery Sci. Technol.* **2019**, *53*, 10174. DOI: 10.1016/j.ddst.2019.101174.
- [14] Y. Xu, V. Musumeci, C. Aymonier, *React. Chem. Eng.* **2019**, *4*, 2030–2054. DOI: 10.1039/C9RE00290A.
- [15] P. F. Siril, M. Türk, *Small* **2020**, *16*, 2001972. DOI: 10.1002/smll.202001972.
- [16] E. S. Alekseev, A. Y. Alentiev, A. S. Belova, V. I. Bogdan, T. V. Bogdan, A. V. Bystrava et al. *Russ. Chem. Rev.* **2020**, *89*, 1337–1427. DOI: 10.1070/RCR4932.
- [17] R. A. Bourne, J. G. Stevens, J. Ke, M. Poliakoff, *Chem. Commun.* **2007**, *44*, 4632–4634. DOI: 10.1039/b708754c.
- [18] J. Morère, E. Sánchez-Miguel, M. J. Tenorio, C. Pando, A. Cabañas, *J. Supercrit. Fluids* **2017**, *120*, 7–17. DOI: 10.1016/j.supflu.2016.10.007.
- [19] D. Patel, S. Kellici, B. Saha, *Processes* **2014**, *2*, 311–332. DOI: 10.3390/pr2010311.
- [20] M. Lora, I. Kikic, *Sep. Purif. Methods* **1999**, *28*, 179–220. DOI: 10.1080/03602549909351647.
- [21] T. A. Walker, D. J. Frankowski, R. J. Spontak, *Adv. Mater.* **2008**, *20*, 879–898. DOI: 10.1002/adma.200700076.
- [22] M. Soares da Silva, R. Viveiros, A. Aguiar-Ricardo, V. D. B. Bonifácio, T. Casimiro, *RSC Adv.* **2012**, *2*, 5075–5079. DOI: 10.1039/C2RA20426F.
- [23] A. I. Cooper, W. P. Hems, A. B. Holmes, *Macromolecules* **1999**, *32*, 2156–2166. DOI: 10.1021/ma981494b.
- [24] L. Ye, K. Yoshimatsu, D. Kolodziej, J. Da Cruz Francisco, E. S. Dey, *J. Appl. Polym. Sci.* **2006**, *102*, 2863–2867. DOI: 10.1002/app.24648.
- [25] C. V. Macedo, M. Soares da Silva, T. Casimiro, E. J. Cabrita, A. Aguiar-Ricardo, *Green Chem.* **2007**, *9*, 948–953. DOI: 10.1039/B617940A.
- [26] R. B. Restani, P. I. Morgado, M. P. Ribeiro, I. J. Correia, A. Aguiar-Ricardo, V. D. B. Bonifácio, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 5162–5165. DOI: 10.1002/anie.201200362.
- [27] V. G. Correia, V. D. B. Bonifácio, V. P. Raje, T. Casimiro, G. Moutinho, C. Lobato da Silva, M. G. Pinho, A. Aguiar-Ricardo, *Macromol. Biosci.* **2011**, *11*, 1128–1137. DOI: 10.1002/mabi.201100126.
- [28] M. Lopes, R. B. Restani, M. P. Carvalho, I. J. Correia, A. Aguiar-Ricardo, V. D. B. Bonifácio, *React. Funct. Polym.* **2021**, *161*, 104846. DOI: 10.1016/j.reactfunctpolym.2021.104846.
- [29] R. F. Pires, J. Frutuoso, A. S. Cortes, A. Aguiar-Ricardo, V. D. B. Bonifácio, *Adv. Mat. Lett.* **2018**, *9*, 383–386. DOI: 10.5185/amlett.2018.1822.
- [30] R. F. Pires, A. Charas, J. Morgado, T. Casimiro, V. D. B. Bonifácio, *J. Appl. Pol. Sci.* **2020**, *137*, 48635. DOI: 10.1002/app.48635.
- [31] K. Nishi, Y. Morikawa, R. Misumi, M. Kaminoyama *Chem. Eng. Sci.* **2005**, *60*, 2419–2426. DOI: 10.1016/j.ces.2004.11.047.
- [32] C. Boyère, C. Jérôme, A. Debuigne, *Eur. Polym. J.* **2014**, *61*, 45–63. DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2014.07.019.

>

Rita F. Pires

Instituto de Bioengenharia e Bio-ciências, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa.

Possui um Mestrado em Química Bio-orgânica pela Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa e é doutorada em Bioengenharia (Programa MIT Portugal) pelo Instituto Superior Técnico da Universidade de Lisboa. O seu trabalho de investigação

tem estado focado na síntese sustentável e pós-modificação de dendrímeros de poliureia, nomeadamente para aplicação em nanoformulações para a terapêutica do cancro e o desenvolvimento de dispositivos para captura e armazenamento de bioeletricidade.

ritafpires@tecnico.ulisboa.pt

ORCID.org/0000-0003-3678-1462

Nomenclatura Química – Paradigmas Novos: a Implementação das Novas Regras na Nomenclatura Química em Manuais Escolares do 8.º Ano de Escolaridade

>
Joana Filomena Rodrigues
Joaquina Teodoro
Maria Assunção Jorge*

Chemistry Nomenclature - New Paradigms: The Implementation of the New Rules in the Chemical Nomenclature in School Manuals of the 8th Year of Schooling. *The rules of chemical nomenclature are not immutable and since their creation in the XVIII century they have been regularly amended and adapted to the scientific knowledge advances. The current IUPAC recommendations put forward important modifications to the nomenclature rules, endeavoring to turn them simpler and more accessible. In this document are provided some examples of modifications to be applied to the 8th year of schooling that derive from the application of the new IUPAC recommendations.*

As regras de nomenclatura química não são imutáveis e desde a sua criação no século XVIII têm sido regularmente alteradas e adaptadas aos avanços no conhecimento científico. As recomendações atuais da IUPAC apresentam alterações importantes e regras novas de nomenclatura numa tentativa de as tornar mais simples e acessíveis. Neste artigo dão-se exemplos aplicados ao 8.º ano de escolaridade que resultam de algumas alterações que ocorrem pela aplicação das mais recentes regras de nomenclatura.

Como professoras do terceiro ciclo do ensino básico a lecionar o 8.º ano de escolaridade da disciplina de Físico-Química, as autoras reconhecem a necessidade de efetivar as recomendações da IUPAC para a Nomenclatura Química, tanto a Orgânica como a Inorgânica, uma vez que estas se encontram traduzidas e adaptadas à língua Portuguesa [1,2]. É no 8.º ano que se inicia o estudo da simbologia e nomenclatura química e, por conseguinte, a introdução da linguagem específica da Química deve ser feita de acordo com as regras atuais de nomenclatura. Nesse sentido, há necessidade de concretizar as alterações introduzidas pelas recomendações da IUPAC da nomenclatura de Química Orgânica publicadas em inglês em 1993 no

Livro Azul e publicadas em português em 2002 [1], e pelas recomendações de Química Inorgânica publicadas em inglês em 2005 no Livro Vermelho e publicadas em português em 2017 [2]. Assim, com base nas recomendações atualmente em vigor procedeu-se à identificação e recomendação em termos de nomenclatura química dos nomes de algumas espécies químicas referidas ao nível do 8.º ano de escolaridade e presentes nos manuais de Física e Química, adotados nas duas escolas em que as autoras lecionam e que também são representativos dos manuais adotados para esse ano de escolaridade nas escolas portuguesas.

Partiu-se dos sistemas de nomenclatura existentes recomendados pela IUPAC, nomeadamente

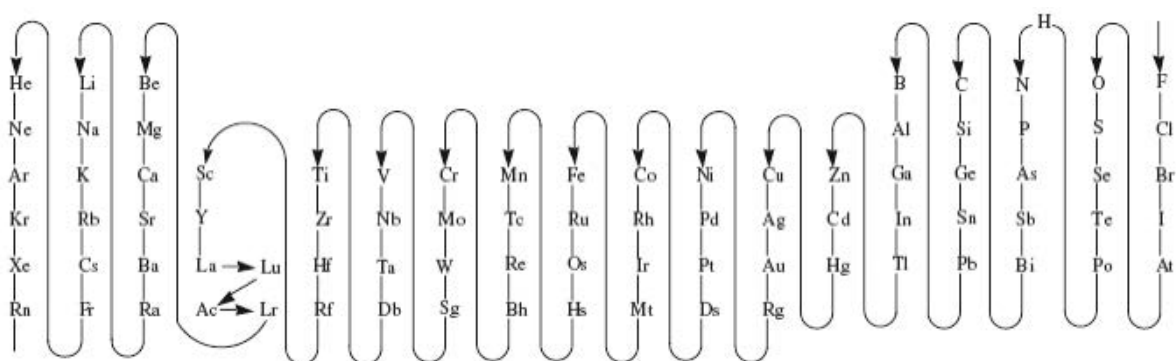


Figura 1 - Sequência dos elementos a ter em consideração na construção do nome seguindo o sistema de nomenclatura composicional [2].

as nomenclaturas composicional, aditiva e substitutiva tendo em mente que a aplicação destes sistemas tem como objetivo fornecer um conjunto de regras para atribuir nomes e fórmulas às espécies químicas, de modo a serem identificadas sem ambiguidade. Também se pretende reduzir ao mínimo os nomes “aceitáveis” para cada espécie química [2].

Dos diversos sistemas de nomenclatura que podem ser utilizados para atribuir um nome a compostos inorgânicos, neste artigo optou-se pela aplicação da nomenclatura composicional. Nesta nomenclatura, o processo de construção dos nomes baseia-se apenas na composição química das entidades a que se quer atribuir um nome, sem qualquer consideração sobre a estrutura ou propriedades. Este processo, que tem por base a fórmula das espécies químicas, origina um nome estequiométrico geral, semelhante aos nomes tradicionais de sais, mas dos quais não se pode inferir nada sobre a natureza química das entidades a que se pretende atribuir o nome [2]. Estes nomes sistemáticos são baseados no número de átomos que existe na espécie química, o qual é indicado por um prefixo multiplicador. Para atribuir o nome a compostos orgânicos utilizou-se a nomenclatura substitutiva, dado que este é o sistema de nomenclatura mais utilizado em Química Orgânica. Estas escolhas foram feitas tendo como base o nível de escolaridade dos estudantes a que esta aprendizagem se destina, coincidindo com o ano em que se inicia o estudo da simbologia química.

Na atribuição de um nome a qualquer espécie química tem de se ter presente que um nome só deve gerar uma fórmula química, mas uma fórmula química pode ser identificada por mais do que um nome. As espécies químicas são átomos, moléculas, iões, pares de iões, radicais, complexos, etc., isto é, entidades singulares distinguíveis separadamente, qualquer que seja a sua natureza [3]. Cada uma destas entidades pode ter um ou mais constituintes que são escritos juntamente com prefixos multiplicadores adequados que traduzem a estequiometria na espécie química.

Para se atribuir o nome a um composto inorgânico deve seguir-se um conjunto de regras que aqui se apresenta de forma resumida [2]:

- Para um composto binário, um dos constituintes é designado como o mais eletropositivo e o outro o mais eletronegativo. O constituinte mais eletronegativo é por convenção o elemento que se encontra mais acima e à direita na sequência dos elementos apresentada na Figura 1.
- Na escrita do nome de um composto binário, escreve-se primeiro o nome do constituinte mais eletronegativo, seguido pelo do constituinte mais eletropositivo separados pela preposição “de”, com os respetivos prefixos multiplicadores, se existirem. O prefixo “mono” deve ser usado sempre que possa haver confusões. Contudo, ao nível introdutório, no 8.º ano, deve ser utilizado sempre que o docente considere que a sua utilização melhora a compreensão.
- O nome do constituinte eletropositivo não se altera. É o mesmo do elemento químico.
- O nome do constituinte eletronegativo é modificado, apresentando a terminação “ato”, “eto” ou “ido”. Os aniões monoatômicos ou homopoliatômicos têm a terminação “eto”. Os aniões heteropoliatômicos têm a terminação “ato”. O anião do oxigénio e outros contendo oxigénio têm a terminação “ido”.

Como referido, foram considerados os manuais escolares *À Descoberta do Planeta Azul*, da Porto Editora [4] e *Físico-Química* da Santillana [5], ambos do 8.º ano de escolaridade, por terem sido adotados pelas duas escolas onde as autoras lecionam, e que representam uma amostra dos manuais adotados nas escolas portuguesas. Nestes manuais analisou-se a adequação dos nomes das espécies químicas referentes às aprendizagens essenciais seguintes: *relacionar a composição qualitativa e quantitativa de uma substância com a sua fórmula química, associando a fórmula à unidade estrutural da substância: átomo, molécula ou grupo de iões; aferir a existência de*

iões, através da análise de rótulos de produtos do dia a dia e, com base numa tabela de iões, escrever a fórmula química, ou o nome de compostos iónicos em contextos diversificados [6].

Para cada um dos manuais analisados, apresenta-se nas Tabelas 1 e 2 a lista de nomes de espécies químicas para as quais são propostos os nomes sistemáticos com base nas regras de nomenclatura atuais. A informação foi organizada do seguinte modo:

- na primeira coluna indica-se o nome das espécies químicas apresentadas nos manuais;

- na segunda coluna são apresentados os nomes sistemáticos das espécies químicas de acordo com as recomendações atuais da IUPAC adaptadas à língua portuguesa seguindo o sistema de nomenclatura composicional, para substâncias inorgânicas, e substitutiva para as substâncias orgânicas. Além dos nomes sistemáticos, são também indicados os nomes comuns aceites nalguns dos exemplos;
- na terceira coluna indicam-se as páginas dos manuais onde se encontram as espécies químicas mencionadas.

Tabela 1 - Comparação entre os nomes das espécies químicas referentes às aprendizagens essenciais no manual *À Descoberta do Planeta Azul* e os nomes sistemáticos atribuídos pelas regras de nomenclatura atuais.

Nome no Manual	Nome Sistemático [1,2]	Página(s)
hidrogénio	di-hidrogénio	30, 35 e 39
oxigénio	dioxigénio	30, 35, 38, 40 e 42
ozono	trioxigénio; ozono	30, 35, 38 e 42
cloro	dicloro	30 e 39
azoto	dinitrogénio; azoto	30, 35, 39 e 42
água	monóxido de di-hidrogénio; água	31, 32, 35, 38 e 40
dióxido de carbono	dióxido de carbono ou dióxido de monocarbono	31, 32, 35 e 39
metano	metano	31, 32, 35, 39 e 42
amoníaco	tri-hidreto de nitrogénio; tri-hidreto de mononitrogénio; amoníaco	31, 32, 35, 39, 40 e 42
etanol	etanol	31, 32, 35, 39 e 40
cloreto de hidrogénio	cloreto de hidrogénio	32 e 39
monóxido de carbono	monóxido de carbono ou monóxido de monocarbono	40
etano	etano	42
dióxido de enxofre	dióxido de enxofre	42
ácido sulfúrico	tetraoxidossulfato de di-hidrogénio; ácido sulfúrico	42
butano	butano	42
ião sódio	sódio(1+)	43 e 44
ião óxido	óxido(2-)	43, 44, 45 e 48
ião amónio	tetra-hidreto de nitrogénio(1+); amónio	43, 44 e 48
ião carbonato	trioxidocarbonato(2-)	43, 44 e 48
ião alumínio	alumínio(3+)	44 e 48
ião cálcio	cálcio(2+)	44 e 48
ião cobre(II)	cobre(2+)	44 e 48
ião ferro(II)	ferro(2+)	44
ião ferro(III)	ferro(3+)	44 e 48
ião prata	prata(1+)	44
ião zinco	zinco(2+)	44

Tabela 1 - Comparação entre os nomes das espécies químicas referentes às aprendizagens essenciais no manual *À Descoberta do Planeta Azul* e os nomes sistemáticos atribuídos pelas regras de nomenclatura atuais (cont.).

Nome no Manual	Nome Sistemático [1,2]	Página(s)
ião magnésio	magnésio(2+)	44 e 48
ião potássio	potássio(1+)	44 e 48
ião sulfato	tetraoxidossulfato(2-)	44 e 48
ião brometo	brometo(1-)	44
ião cloreto	cloreto(1-)	44, 45 e 48
ião dicromato	heptaoxidodicromato(2-)	44
ião fosfato	tetraoxidofosfato(3-)	44 e 48
ião hidrogenocarbonato	hidrogenio(trioxidocarbonato)(1-)	44 e 48
ião hidróxido	hidróxido(1-)	44 e 48
ião iodeto	iodeto(1-)	44
ião nitrato	trioxidonitrato(1-)	44 e 48
cloreto de sódio	cloreto de sódio	45
nitrato de potássio	trioxidonitrato de potássio ou trioxidonitrato de monopotássio	45 e 46
cloreto de cobre(II)	dicloreto de cobre	45
dicromato de potássio	heptaoxidodicromato de dipotássio	46
sulfato de alumínio	tris(tetraoxidossulfato) de dialumínio	46
sulfato de sódio	tetraoxidossulfato de dissódio	46
cloreto de cálcio	dicloreto de cálcio	46
iodeto de prata	iodeto de prata	46
hidróxido de alumínio	tri-hidróxido de alumínio	46
sulfato de ferro(III)	tris(tetraoxidossulfato) de diferro	46
fosfato de sódio	tetraoxidofosfato de trissódio	46
carbonato de potássio	trioxidocarbonato de dipotássio	46
hidróxido de sódio	hidróxido de sódio	46
sulfato de potássio	tetraoxidossulfato de dipotássio	46
cloreto de magnésio	dicloreto de magnésio	46
nitrato de alumínio	tris(trioxidonitrato) de alumínio	46
fosfato de cálcio	bis(tetraoxidofosfato) de tricálcio	46
cloreto de amónio	cloreto de tetra-hidretonitrogénio	46
óxido de magnésio	óxido de magnésio ou monóxido de monomagnésio	46
carbonato de cálcio	trioxidocarbonato de cálcio	46
nitrato de cálcio	bis(trioxidonitrato) de cálcio	46
hidróxido de magnésio	di-hidróxido de magnésio	46

Tabela 2 - Comparação entre os nomes das espécies químicas referentes às aprendizagens essenciais no manual *Físico-Química* e os nomes sistemáticos pelas regras de nomenclatura atuais.

Nome no Manual	Nome Sistemático [1,2]	Página(s)
oxigénio	dioxigénio	25, 26 e 27
enxofre	octaenxofre	25 e 27
sulfato de sódio	tetraoxidossulfato de dissódio	25
sulfato de cobre	tetraoxidossulfato de cobre	25
água	monóxido de di-hidrogénio; água	25, 26 e 27
dióxido de carbono	dióxido de carbono	25, 26 e 27
metano	metano	26
amoníaco	tri-hidreto de mononitrogénio; amoníaco	26
ácido acético	ácido etanóico; ácido acético	26
trióxido de enxofre	trióxido de monoenxofre	26
pentacloreto de fósforo	pentacloreto de monofósforo	26
ozono	trioxigénio; ozono	27
propano	propano	27
álcool etílico	etanol	27
água oxigenada	dióxido de di-hidrogénio	27
ião potássio	potássio(1+)	28
ião alumínio	alumínio(3+)	28 e 29
ião fluoreto	fluoreto(1-)	28 e 29
ião óxido	óxido(2-)	28 e 29
ião amónio	tetra-hidreto de nitrogénio(1+); amónio	29
ião bário	bário(2+)	29
ião cálcio	cálcio(2+)	29
ião chumbo	chumbo(2+)	29
ião cobre(I)	cobre(1+)	29
ião cobre(II)	cobre(2+)	29
ião ferro(III)	ferro(3+)	29
ião hidrogénio	hidrogénio(1+)	29
ião magnésio	magnésio(2+)	29
ião potássio	potássio(1+)	29
ião prata	prata(1+)	29
ião sódio	sódio(1+)	29
ião zinco	zinco(2+)	29
ião brometo	brometo(1-)	29
ião carbonato	trioxidocarbonato(2-)	29
ião cloreto	cloreto(1-)	29
ião cromato	tetraoxidocromato(2-)	29
ião dicromato	heptaoxidodicromato(2-)	29

Tabela 2 - Comparação entre os nomes das espécies químicas referentes às aprendizagens essenciais no manual *Físico-Química* e os nomes sistemáticos pelas regras de nomenclatura atuais (cont.).

Nome no Manual	Nome Sistemático [1,2]	Página(s)
ião fosfato	tetraoxidofosfato(3-)	29
ião fluoreto	fluoreto(1-)	29
ião hidrogenocarbonato	hidrogenio(trioxidocarbonato)(1-)	29
ião hidróxido	hidróxido(1-)	29
ião iodeto	iodeto(1-)	29
ião nitrato	trioxidonitrato(1-)	29
ião permanganato	tetraoxidomanganato(1-)	29
ião sulfato	tetraoxidossulfato(2-)	29
ião sulfureto	sulfureto(2-) ou monossulfureto(2-)	29
cloreto de sódio	cloreto de sódio	30
sulfato de cobre(II)	tetraoxidossulfato de cobre	30
dicromato de potássio	heptaoxidodicromato de dipotássio	30
nitrato de magnésio	bis(trioxidonitrato) de magnésio	30
óxido de ferro(III)	trióxido de diferro	30
fosfato de magnésio	bis(tetraoxidofosfato) de trimagnésio	31
hidróxido de cálcio	di-hidróxido de cálcio	31
nitrato de potássio	trioxidonitrato de potássio	31
fosfato de alumínio	tetraoxidofosfato de alumínio	31
carbonato de cálcio	trioxidocarbonato de cálcio	31
óxido de sódio	óxido de dissódio	31
cloreto de magnésio	dicloreto de magnésio	31
sulfato de alumínio	tris(tetraoxidossulfato) de dialumínio	31
fosfato de cálcio	bis(tetraoxidofosfato) de tricálcio	31
hidrogenocarbonato de lítio	hidrogenio(trioxidocarbonato) de lítio	31
hidróxido de amónio	hidróxido de tetra-hidretonitrogénio	31

Como se pode constatar nas Tabelas 1 e 2, onde se apresenta uma proposta de adequação dos nomes de algumas espécies químicas às mais recentes recomendações da nomenclatura IUPAC adaptadas à língua portuguesa, fica patente que se está perante uma alteração do paradigma relativamente à nomenclatura química, uma vez que deixa de haver a necessidade de relacionar as propriedades químicas dos compostos com o nome atribuído, proporcionando uma aplicação intuitiva e mais fácil das regras de nomenclatura.

Este pequeno contributo pretende demonstrar que é possível implementar no ensino básico as “novas” regras de nomenclatura logo desde o início do estudo da Química. No entanto, esta mudança precisa que todos os intervenientes no processo educativo se envolvam na promoção de boas práticas. Nesse sentido será necessário

um maior envolvimento por parte do Ministério da Educação através de orientações concretas em termos de atualização da nomenclatura às recomendações da IUPAC adaptadas à língua portuguesa a adotar no ensino básico e secundário, na disciplina de Físico-Química, assim como nas disciplinas de Ciências Naturais e Biologia. Esta tarefa terá necessariamente que envolver não só o Ministério da Educação mas a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) na elaboração de orientações para as editoras que, certamente, depressa as aplicarão. Sem dúvida que urge a implementação das recomendações da IUPAC sobre nomenclatura, que se encontram traduzidas e adaptadas à língua portuguesa desde 2002 e 2017, respetivamente, para a Nomenclatura de Química Orgânica e de Química Inorgânica, e desta forma ter impacto na literacia científica dos professores e estudantes.

Agradecimentos

As autoras agradecem aos formadores M. Clara F. Magalhães, M. Amparo F. Faustino e José Alberto L. Costa pela partilha de conhecimento, pelo gosto de comunicar e pela dedicação transmitida em cada sessão da ação “Nomenclatura Química: Adequação das Regras da IUPAC à Língua Portuguesa” promovida pela Sociedade Portuguesa de Química. Agradecemos ainda o desafio lançado para a elaboração deste artigo, tendo como base o trabalho de grupo realizado durante a ação de formação que nos permitiu refletir sobre a pertinência deste tema para a nossa prática pedagógica.

Referências

- [1] “Guia IUPAC para a Nomenclatura de Compostos Orgânicos”, R. Panico, W. Powell e J. -C. Richer (eds.), tradução portuguesa nas variantes europeia e brasileira de A. C. Fernandes, B. J. Herold, H. Maia, A. P. Rauter, J. A. R. Rodrigues, Lidel, Lisboa, **2010**.
- [2] N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn e A. T. Hutton (eds.), “Nomenclatura de Química Inorgânica, Recomendações da IUPAC de 2005”, tradução portuguesa nas variantes europeia e brasileira de J. Cardoso, J. A. L. Costa, R. B. Faria, M. H. Garcia, R. T. Henriques, B. J. Herold, J. Marçalo, M. C. F. Magalhães, O. Pellegrino, O. A. Serra, IST Press, Lisboa, **2017**.
- [3] A. D. McNaught, A. Wilkinson “Compendium of Chemical Terminology – IUPAC recommendations” (Gold Book), 2nd ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1997**. Versão online criada por S. J. Chalk, **2019**. DOI: 10.1351/goldbook.M03986.
- [4] N. Maciel, C. A. Duarte, “À descoberta do Planeta Azul”, Porto Editora, Porto, **2018**.
- [5] I. Pires, S. Ribeiro, “Físico-Química”, Santillana Editores, Carnaxide, **2014**.
- [6] Aprendizagens Essenciais, Articulação com o Perfil de Alunos - 8.º ano, 3.º ciclo do ensino básico - Físico-Química, Direção Geral da Educação, Lisboa, **2018**.

>

Joana Rodrigues

Salesianos do Estoril – Escola.
Licenciada em Ensino da Física e da Química - variante Química pela Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa. Em 2015 concluiu o Mestrado em Educação Especial - Domínio Cognitivo e Motor pela Faculdade de Motricidade Humana da Universidade de Lisboa. Exerceu a profissão de docente no grupo disciplinar de Físico-Química no ensino público entre setembro de 2008 e agosto de

2014. A partir desta data é docente dos Salesianos do Estoril – Escola.

joana.rodrigues@estoril.salesianos.pt
ORCID.org/0000-0002-0870-6484

>

Joaquina Teodoro

Escola Básica Soeiro Pereira Gomes.
Licenciada em Engenharia Química Industrial pelo Instituto Superior de Engenharia de Lisboa. Fez profissiona-

lização em exercício na Escola Superior de Educação de Santarém. Exerce a profissão de docente no grupo disciplinar de Físico-Química no ensino público desde setembro de 1995.
joaquina.teodoro@spg.edu.pt
ORCID.org/0000-0001-9411-4292

>

*Maria Jorge

Salesianos do Estoril – Escola.

Bacharel em Engenharia Química pelo Instituto Superior de Engenharia de Lisboa. Fez profissionalização na Universidade Aberta, no Curso de Qualificação em Ciências de Educação, em regime de voluntariado. Exerce a profissão de docente no grupo disciplinar de Físico-Química nos Salesianos do Estoril - Escola desde setembro de 1985.
assuncao.jorge@estoril.salesianos.pt
ORCID.org/0000-0002-3564-2236

Please join us in congratulating Chemistry Europe Fellows Class 2018/ 2019

Chemistry Europe – a partnership of 16 European chemical societies – established this fellowship to honor extraordinary contributions.



Ana C. Albéniz



Annette
Beck-Sickinger



Mário N. d. M. S.
Berberan E Santos



Matthias Bickelhaupt



Sílvia Bordiga



Uwe T. Bornscheuer



Anthony J. Burke



Gilberte Chambaud



Benoît Champagne



Iris Cornet



Pier G. Cozzi



Bas de Bruin



Gianluca Farinola



Ivana Fleischer



Katharina Fromm



Karl Gademann



Piet Herdewijn



Nicola Hüsing



Lene Hviid



Ferenc Joó



Karl Anker Jørgensen



Burkhard König



Martin Kotora



Ronald Micura



Viktor Milata



Jean-François
Nierengarten



Marcin Opałło



Pedro J. Pérez



Amélia P. Rauter



Vladimír Šindelář



Agneta Sjögren



Matthieu Sollogoub



Peter Somfai



Sir J. Fraser Stoddart



Nikos Tagmatarchis



Tomás Torres



Anna Trzeciak



Andy Brunning

A Química de Quase Tudo

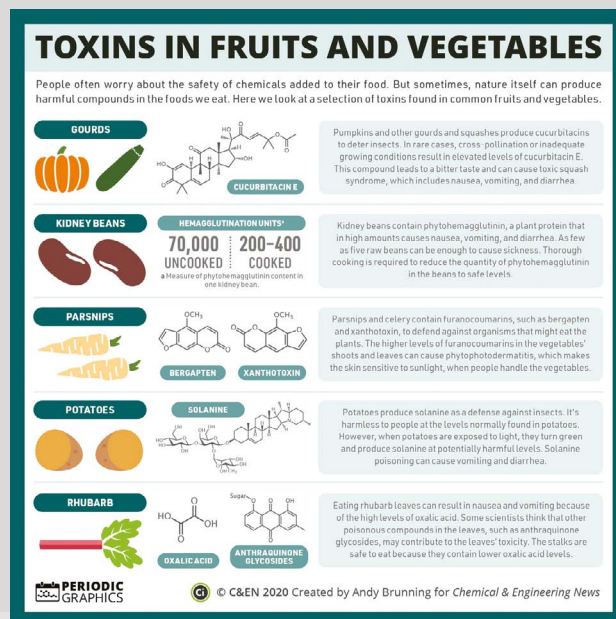
Andy Brunning (Químico e Educador, Cambridge, UK) é o autor do blogue *Compound Interest*. As infografias deste blogue tornaram-se virais na internet e em 2008 o blogue ganhou um prémio da *Association of British Science Writers' Dr. Katharine Giles Science*. Atualmente as infografias são feitas com o patrocínio da *Chemical & Engineering News*, uma revista semanal da Sociedade Americana de Química. Os temas abordados são muito diversos, e se ainda não conhecem a exploração é obrigatória, apenas por curiosidade científica ou como recurso educativo.

Veja mais em compoundchem.com.

>

Vasco Bonifácio

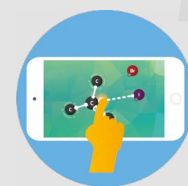
vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt



Toxinas em frutos e vegetais: compoundchem.com/2020/12/10/natural-toxins.

Jogar com Mecanismos?

A *Alchemie* lançou uma aplicação que permite exercitar os nossos conhecimentos sobre mecanismos de reações químicas. Os desafios são apresentados sob a forma de jogos. Existem vários níveis e alguns são gratuitos. Contudo, para experimentar reações com um nível mais avançado (ex. substituição nucleofílica ou reações de eliminação), é necessário fazer um pagamento (cerca de 8 euros para um período de utilização de 6 meses). Para além da aplicação para telemóvel, *Mechanism by Alchemie – Organic Chemistry*, é possível usar a versão *online* para computador. Em ambos os casos é necessário um registo de utilizador. A química orgânica nunca foi tão divertida!



Mechanism by Alchemie – Organic Chemistry



Veja mais em alchemie.ie/mechanisms.

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

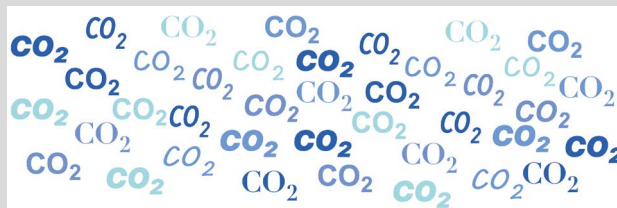
Gelo Seco

>

Marta Piñeiro

mpineiro@qui.uc.pt

Gelo seco é dióxido de carbono (CO_2) no estado sólido. À temperatura ambiente o dióxido de carbono é um gás e, portanto, para obter gelo seco é necessário arrefecê-lo a uma temperatura inferior a $-78\text{ }^\circ\text{C}$, que é o seu ponto de congelação. Com o aumento da temperatura, à pressão ambiente, o CO_2 sólido sublima, isto é, passa diretamente ao estado gasoso sem passar pelo estado líquido. Por isso, é característico o fumegar, a formação de um gás branco e denso, quando se coloca gelo seco à temperatura ambiente. Este comportamento é distinto do verificado com o gelo “comum”. Este, formado por água, ao descongelar forma água no estado líquido e humedece o ambiente. O gelo seco, ao passar diretamente para o estado gasoso e não conter água, permite arrefecer sem humedecer o ambiente.

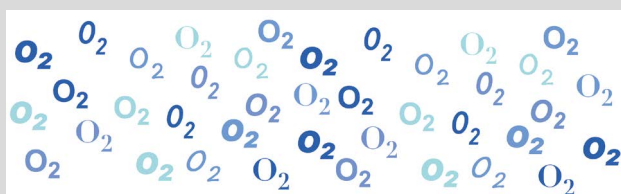


O gelo seco possui várias utilizações. Evidentemente, é utilizado na área da química em contexto laboratorial para arrefecer ou no transporte e armazenamento de reagentes. Num contexto mais geral, pode ser utilizado para manter produtos alimentares a baixas temperaturas (nomeadamente durante o transporte aéreo), na apresentação de alimentos e bebidas na restauração, em espetáculos para criar efeitos especiais através da formação de densas nuvens de gás, para acelerar o crescimento de plantas e na eliminação de infestações locais de percevejos, entre muitas outras.

Saiba mais em:

Infoescola, infoescola.com/compostos-quimicos/gelo-seco (acedido em 05/03/2021).

The Iceman, the-iceman.com/dry-ice/dry-ice-uses (acedido em 05/03/2021).



Oxigénio

>

Marta Piñeiro

mpineiro@qui.uc.pt

O ar é a mistura de gases que formam a atmosfera sendo constituído maioritariamente por moléculas de nitrogénio (ca. 78%) e oxigénio (ca. 21%). O restante 1% é constituído por diversos gases como o dióxido de carbono ou o ozono e gases nobres como o árgon ou o néon. O ar, essa mistura de espécies químicas, rodeia-nos constantemente, está sempre em contacto connosco, mas apenas o sentimos e somos mais conscientes da sua presença quando a brisa move as folhas das árvores ou quando inspiramos profundamente. Neste caso, sentimos as nossas narinas a arrefecer e o nosso peito a inchar, cheio de ar, cheio de química! A molécula de oxigénio que enche os nossos pulmões é essencial à nossa vida e à de todos os seres vivos aeróbios. Esta molécula tão

simples (O_2), constituída por dois átomos de oxigénio ligados por uma ligação dupla, não tem cor, odor nem sabor, mas é sinónimo de vida.

Lavoisier estabeleceu as propriedades do gás, mostrou que ele existia no ar e na água, revelou o seu papel fundamental nas combustões e deu o nome de *oxigénio* à substância descoberta por Scheele e Priestley em estudos independentes no século XVIII.

Na indústria, a matéria-prima utilizada na obtenção de O_2 é o ar. Em unidades de separação de ar, através de várias etapas que envolvem a compressão, adsorção, arrefecimento, condensação, liquefação, evaporação e destilação, o ar é dividido nos seus componentes individuais. Simplificando, o ar é comprimido e arrefecido até atingir tempe-

raturas inferiores a $-200\text{ }^{\circ}\text{C}$ e transforma-se em líquido (o O_2 liquefaz-se a $-183\text{ }^{\circ}\text{C}$). Neste ponto, através de destilação fracionada, é possível separar os componentes do ar, entre eles o O_2 , com elevada pureza. O oxigénio é armazenado, por exemplo em cilindros de O_2 comprimido, que permitem o seu transporte e utilização.

Na indústria química o oxigénio é utilizado em diversos processos, por exemplo na preparação de aço ou na solda oxiacetilénica. Em hospitais e unidades de saúde, o O_2 possui muitas utilizações, nomeadamente: em determinadas patologias ou condições clínicas, onde há um processo respiratório deficiente ou necessidade de incrementar a oxigenação dos tecidos

(ultimamente muito utilizado por causa da COVID-19); como veículo para outros medicamentos, por meio de inalação; como parte do fluxo de gás, em anestesia ou terapia intensiva; em terapias com oxigénio hiperbárico (pressão elevada) no tratamento de embolia gasosa, intoxicação por monóxido de carbono e tratamento de feridas, entre outros. Oxigénio...um sopro de vida!

Saiba mais em:

Pubchem, pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Oxygen (acedido em 05/03/2021).

Pesquisa Escolar Química, educacao.uol.com.br/disciplinas/quimica/oxigenio-propriedades-e-usos.htm?cmpid=copiaecola (acedido em 05/03/2021).

J. Xu, T. Wang, Q. Chen, S. Zhang, J. Tan, *Front. Mech. Eng.* **2020**, *15*, 24-42. DOI: 10.1007/s11465-019-0558-6.

A Corrosão do Ferro

>

Sérgio P. J. Rodrigues

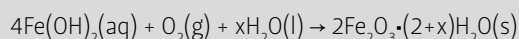
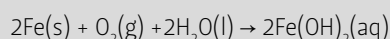
spjrodrigues@ci.uc.pt

Talvez não tenhamos muitas razões para festejar, mas temos confiança na ciência e, se sairmos à rua, para trabalhar ou em passeio deparamo-nos com química. Nos nossos bolsos e em casa, mas também nas ruas há muitos locais e processos que evocam esta ciência. Desde os modernos centros de investigação e ensino, aos edifícios históricos e nomes de ruas, até às coisas mais insignificantes. Há surpresas nas referências a artes e indústrias desaparecidas e nas que podemos encontrar hoje. E nem todas as coisas que evocam química têm um local definido. Podemos encontrar química nos cheiros e sabores, na natureza e nas tecnologias e atividades humanas. Podemos deparar com histórias curiosas sobre produtos farmacêuticos ou agroquímicos. Encontrar química nos equipamentos urbanos, sinais de trânsito, pavimentos das ruas, ar condicionado, meios de transporte e, na realidade, em tudo o que nos rodeia.

Nesta nota vou só referir uma coisa muito comum: a corrosão do ferro e como a evitamos.

A corrosão do ferro é um processo complexo, mas pode ser explicado através de duas reações químicas. O metal passa ao estado de ferro(II) e depois ao de ferro(III) na presença de oxigénio e água. A “ferrugem”

é um óxido muito poroso e, na presença de oxigénio e água, o processo vai continuar.



O ferro está à nossa volta nas mais diferentes formas. Este metal tem propriedades magnéticas (daí poder ser facilmente identificado com um íman), mas alguns aços inoxidáveis (ligas com cromo e outros metais) podem não ter. Uma das formas de evitar a corrosão é através de ligas, outras são a pintura e a cobertura com metais, menos nobres como o zinco (os postes de sinalização vertical, por exemplo, têm devido a isso um aspeto característico), ou mais nobres (a folha de flandres, por exemplo, coberta com estanho, e o cobre que reveste algumas moedas, entre muitas outras coisas). Já se perguntaram porque as moedas

de um a cinco cêntimos, sendo aparentemente de cobre (que não é magnético) atraem os ímanes? São de ferro coberto de cobre, porque o cobre, sendo mais dispendioso, poderia tornar a moeda mais cara do que o seu valor facial! As coisas à nossa volta têm que ver com química. Só temos de a ver.

Saiba mais em:

Inicialmente apresentado no Diário de Coimbra de 27 de fevereiro de 2011, percursosquimicos.blogspot.com/2011/04/um-convite-para-sair-e-festejar (acedido em 08/04/2021).

Coisas Que Não Vemos a Olho Nu

>

Sérgio P. J. Rodrigues
spjrodrigues@ci.uc.pt

Vamos procurar ver, durante os nossos passeios na rua, coisas que não podemos ver diretamente, mas que podemos detetar. A luz ultravioleta do Sol não se vê, mas pode causar queimaduras e ionizar os materiais. Devido ao efeito das radiações ultravioleta queimamo-nos ao sol, podemos desenvolver cataratas nos olhos e o branco das camisas e papéis parece mais branco. Podemos detetá-la com espectrofotómetros, claro, e podemos ver os seus efeitos quando ativa moléculas que fluorescem no visível ou em materiais que fosforescem. Mas, sem grandes equipamentos (há lâmpadas económicas que podem ser compradas), podemos ver como a luz ultravioleta permite a fluorescência da água tônica, do amido e dos branqueadores óticos, e ativa os relógios e alguns anúncios de emergência. Uma água tônica à janela fica mais azulada, mesmo sem lâmpada ultravioleta. Como são radiações ionizantes, matam os micróbios, mas também nos podem provocar danos. Assim, não devemos olhar para elas e devemos usar óculos de



Estrutura molecular da quinina.

proteção. Um efeito espetacular é o da clorofila, que fluoresce em vermelho e isso é usado nos satélites. Com óculos de sol que polarizam a luz temos também efeitos interessantes. Por exemplo, os vidros duplos vão parecer mais roxos e os vidros temperados notam-se aos quadrados devido à têmpera. Podemos assim, com óculos de sol de luz polarizada, distinguir os vidros dos automóveis. A radiação infravermelha não é visível aos nossos olhos, mas esta pode ser usada para medir temperaturas, por exemplo. Podemos usar a câmara de um telemóvel (que deteta uma parte da radiação infravermelha) para ver a luz de um comando, por exemplo. O que é invisível torna-se visível!

Saiba mais em:

Percursos Químicos, Passeio pelas coisas que não se podem ver a olho nu, percursosquimicos.blogspot.com/2020/05/passeio-pelas-coisas-que-nao-se-podem (acedido em 11/04/2021).

Vegy Slime

>
Marta C. Corvo



Introdução

Esta atividade apresenta uma alternativa para a preparação de *slime*, a substância viscosa que faz as delícias dos mais novos. A maioria das preparações existentes utiliza algumas substâncias com toxicidade considerável. O *slime* aqui proposto é obtido a partir de substâncias não tóxicas, de grau alimentar.

Atenção: Esta experiência requer a supervisão de um adulto. O pó de psílio ou *Psyllium* pode ser encontrado em supermercados e ervanárias. Esta substância não é tóxica, mas como qualquer produto alimentar poderá causar alergias.

Material

- Pó de psílio
- Água
- Colher de medida
- Copo de medida
- Espátula
- Recipiente adequado ao micro-ondas

Procedimento

1. Transferir 200 mL de água para um recipiente.



2.

Adicionar uma colher de chá de pó de psílio e misturar com a espátula.



3.

Levar o recipiente ao micro-ondas na potência média. Quando começar a borbulhar, interromper o aquecimento para que acalme, e retomar novamente até perfazer 5 minutos de aquecimento.



4.

Esperar que arrefeça (cerca de 30 minutos).

5

■ O vegy slime está pronto!



Explicação

O psílio (*psyllium*) é uma planta do género *Plantago* cujas sementes são utilizadas comercialmente como fibras dietéticas e que podem ser usadas como espessante alimentar. A casca destas sementes contém polímeros - substâncias constituídas por unidades mais pequenas, os monómeros, que se repetem e estão ligados entre si formando cadeias. Os polímeros das cascas da semente do psílio são polissacarídeos que conseguem absorver uma grande quantidade de água e aumentam de volume. Na presente atividade, o vegy slime foi obtido ao misturar a água com o pó de psílio. A substância viscosa que se formou é composta por uma suspensão de um líquido (água) disperso num sólido (partículas de casca de psílio). O aquecimento no micro-ondas tornou mais rápida a dispersão. Nesta preparação podem ser utilizados corantes alimentares (adicionados na água antes da adição do pó de psílio).



Referências

[1] Adaptado de: onelittleproject.com/two-ingredient-metamucil-slime (acedido em 20/03/2021).

>

Marta C. Corvo


Faculdade de Ciências e Tecnologia,
Universidade Nova de Lisboa.

É investigadora no i3N|CENIMAT,
Dep. Ciência dos Materiais da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa, dedicada à ressonância magnética nu-


clear. Além da divulgação de ciência, interessa-se pelo desenvolvimento de novos materiais para captura de CO₂, armazenamento de energia e preservação de obras de arte.

marta.corvo@fct.unl.pt

[ORCID.org/0000-0003-0890-6133](https://orcid.org/0000-0003-0890-6133)



European Conference on Green and Sustainable Chemistry



5th

**EuChemS
Conference on
Green and Sustainable
Chemistry**

**26-29
September 2021**
Virtual Conference

www.5eugsc.org

Mais informações em:
5eugsc.org

5.^a Conferência EuChemS – Química Verde e Sustentável

A 5.^a EuGSC (5th *European Conference on Green and Sustainable Chemistry*), inicialmente prevista para Tessalonica (Grécia), decorrerá de uma forma totalmente virtual entre 26 e 29 de setembro de 2021, e será organizada conjuntamente pela Associação de Químicos Gregos e a EuChemS/Divisão de Química Verde e Sustentável. Este é o quinto evento de uma série de conferências de sucesso da EuChemS sobre Química Verde e Sustentável que começaram há oito anos em Budapeste (2013), seguidas das conferências em Lisboa (2015), York (2017) e Tarragona (2019). As conferências EuGSC oferecem a oportunidade de discutir os últimos desenvolvimentos da química verde e sustentável, de

expandir as relações existentes e estabelecer novas relações entre a academia e a indústria. Permitem ainda disseminar a filosofia e os princípios do desenvolvimento sustentável e da (bio)economia circular.

Os tópicos da 5.^a EuGSC incluem a área abrangente da química e tecnologia verdes, com maior ênfase em processos catalíticos e sintéticos sustentáveis, biomassa e utilização de CO₂, combustíveis alternativos e energia verde, processos químicos de baixa energia, prevenção e remediação de poluição, métricas de química verde e avaliação ambiental, processos industriais sustentáveis, reciclagem e valorização de resíduos e (bio)economia circular.

XXVI Encontro Galego –Portugués de Química

Todos os anos realiza-se alternadamente entre Portugal e Galiza um Congresso Internacional dedicado à Química. Estes eventos são organizados em Portugal pela Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e na Galiza pelo Colégio Oficial de Químicos da Galiza e Associação de Químicos da Galiza. Em 2021, o XXVI Encontro Galego-Portugués de Química realizar-se-á entre os dias 17 e 19 de novembro no Pazo da Cultura de Pontevedra (Galiza, Espanha). O Encontro Galego-Portugués de Química é um Congresso Internacional de referência para que os investigadores e estudantes que trabalham nos diferentes campos da Química Fundamental e Aplicada apresentem os seus trabalhos sob a forma

de comunicações orais e em painel. A submissão de comunicações decorre até 30 de setembro de 2021.



Colégio Oficial de Químicos de Galicia

INTERNATIONAL CONFERENCE
XXVI ENCONTRO GALEGO PORTUGUÉS DE QUÍMICA

SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA

Opening Ceremony, Plenary Speaker
Prof. Dr. Stanley Whittingham
Nobel Prize in Chemistry, 2019

Pontevedra (Spain)
17-19th of November, 2021

Mais informações em:
encontrogalegoportugues.org

2.^a Conferência de Conversão e Catálise de CO₂



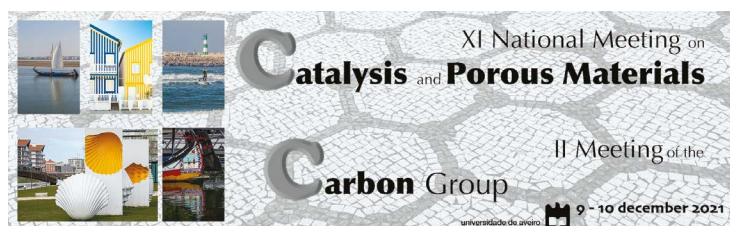
Mais informações em:
fusion-conferences.com/conference/104

A 2.^a Conferência de Conversão e Catálise de CO₂ (2nd Carbon Dioxide Conversion Catalysis Conference, CDCC-2) irá decorrer em Lisboa de 6 a 9 de novembro de 2021. Esta conferência reunirá investigadores, académicos e industriais especialistas na conversão catalítica do CO₂ a produtos de valor acrescentado. Os temas incluem soluções catalíticas heterogéneas, homogéneas ou híbridas para a síntese de produtos de química fina, farmacêuticos, poliméricos e vetores de energia.

As sessões científicas encontram-se organizadas para maximizar as interações entre os participantes, com amplo espaço para discussão durante e em redor da conferência, e uma sessão de comunicações em painel para destacar os mais recentes desenvolvimentos na área de catálise de CO₂. O principal objetivo da conferência é tornar-se uma referência para *networking* e exploração de novas ideias e colaborações na valorização do CO₂.

XI Encontro Nacional de Catálise e Materiais Porosos (XI ENCMP) & II Reunião do Grupo do Carbono (II RGC)

Mais informações em:
xiencmp-iirgc.events.chemistry.pt



Face à situação pandémica que se está a viver e por decisão conjunta da Sociedade Portuguesa de Química, da Divisão de Catálise e Materiais Porosos e do Grupo de Carbono, o XI ENCMP/II RGC, inicialmente agendado para 2020, foi adiado para 9-10 dezembro de 2021, mantendo-se em Aveiro. Este evento proporcionará aos académicos, industriais, investigadores e estudantes de diferentes áreas a oportunidade de se encontrarem num ambiente acolhedor para a troca de ideias, estímulo de colaborações, construção de conhecimento e formação de estudantes em áreas tão variadas como a catálise, química, materiais, energia e biologia.

O Programa Científico incluirá duas sessões onde serão honradas as memórias dos Professores Peter Carrott e Ana Cavaleiro. Ao longo destes dois dias terão lugar várias conferências plenárias e convidadas, bem como comunicações orais e em painel. A submissão de comunicações pode ser efetuada até 17 de setembro de 2021.

Agenda

(devido à crise pandémica COVID-19, alguns dos eventos poderão sofrer ajustes de calendarização)

> julho de 2021

05 - 06 de julho de 2021, *online*, Bélgica
22nd European Symposium on Organic Chemistry
esoc2021.org

05 - 09 de julho de 2021, *online*, Reino Unido
8th Conference of the Federation of European
Zeolite Associations (FEZA 2020)
fezaconference.org

07 - 09 de julho, *online*, Eslovénia
9th European Variety in University Chemistry
Education Conference
eurovariety2021.si

07 - 09 de julho de 2021, *online*, França
56th International Conference on Medicinal
Chemistry (RICT2021)
rict2021.org

12 - 16 de julho de 2021, *online*, EUA
International Symposium on Solubility
Phenomena and Related Equilibrium Processes
web.cvent.com/event/7d1b84d-
9-641a-4c14-9e4d-5b536696a457

14 - 16 de julho de 2021, Braga, Portugal
XXVII Encontro Nacional da Sociedade
Portuguesa de Química (XXVII ENSPQ)
xxviienspq.events.chemistry.pt

agosto de 2021

13 - 20 de agosto, *online*, Canada
IUPAC | CCCE 2021
cheminst.ca/conference/ccce2021

29 de agosto - 01 de setembro, *online*, Alemanha
GDCh Science Forum Chemistry 2021 (WiFo 2021)
en.wifo-2021.de

29 de agosto - 02 de setembro
de 2021, Madrid, Espanha
XXIV European Conference on
Organometallic Chemistry (EUCOMC XXIV)
congresosalcala.fgua.es/eucomc2021virtual

29 de agosto - 02 de
setembro de 2021, *online*, Suíça
XXVI EFMC International
Symposium on Medicinal Chemistry
efmc-ismc.org

31 de agosto - 03 de setembro 2021, Évora, Portugal
International Symposium on Synthesis and
Catalysis 2021 (ISySyCat2021)
isysycat2021.events.chemistry.pt

setembro de 2021

05 - 07 de setembro de 2021, Tarragona, Espanha
13th Spanish-Italian Symposium on
Organic Chemistry (SISOC XIII)
sisoc2020.com

05 - 08 de setembro de 2021, Funchal
(Ilha da Madeira), Portugal
XV Encontro de Química dos Alimentos
xveqa.events.chemistry.pt

06 - 08 de setembro de 2021, Roma, Itália
Chemistry World Conference
chemistryworldconference.com

06 - 08 de setembro de 2021, Roma, Itália
Global Conference on Pharmaceuticals and Novel Drug
Delivery Systems (PDDS 2021)
pharmaceuticsconference.com

08 - 10 de setembro de 2021, Karaganda, Cazaquistão
25th Conference on Isoprenoids
isoprenoids25.phyto.kz

17 - 18 de setembro de 2021, *online*, Portugal
1.º Encontro Nacional de História da Química
ienhq.events.chemistry.pt

26 - 29 de setembro de 2021, *online*, Grécia
5th EuChemS Conference on Green and
Sustainable Chemistry (EUGSC-5)
5eugsc.org

27 - 29 de setembro de 2021, Paris, França
Global Conference on Catalysis, Chemical
Engineering & Technology (CAT 2021)
catalysis-conferences.magnusgroup.org

30 de setembro - 02 de outubro de 2021, Paris, França
Euro-Global Conference on Food Science and
Technology (FAT 2021)
food-chemistry-technology-conferences.magnus-
group.org

outubro de 2021

21 - 23 de outubro de 2021
International Conference on Catalysis and
Chemistry (Catalysis 2021)
catalysiscongress.com

novembro de 2021

06 - 09 de novembro de 2021, Lisboa, Portugal
2nd Carbon Dioxide Conversion
Catalysis Conference (CDCC21)
fusion-conferences.com/conference/104

17 - 19 de novembro de 2021, Galiza, Espanha
XXVI Encontro Galego Português de Química
encontrogalegoportugues.org

dezembro de 2021

09 - 10 de dezembro de 2021, Aveiro, Portugal
XI Encontro Nacional de Catálise e
Materiais Porosos (XI ENCMP) & II Reunião do
Grupo do Carbono (II RGC)
xiencmp-iirgc.events.chemistry.pt

11 - 14 de dezembro de 2021, *local a anunciar*
Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação

dezembro de 2021, *datas e local a anunciar*
Encontro de Química Analítica e Encontro
Nacional de Cromatografia

janeiro de 2022

janeiro de 2022, Lisboa, *datas a anunciar*
Encontro de Química Orgânica e Terapêutica

abril de 2022

19 - 22 de abril de 2022, Nijmegen, Países Baixos
European Forum on Analytical Sciences and
Technology (EuroFAST2022)
eurofast2022.eu

junho de 2022

28 de junho - 01 de julho de 2022,
Ljubljana, Eslovénia
26th International Symposium on
Separation Sciences
iss2020.si

junho de 2022, *datas e local a anunciar*
Encontro do Grupo de Coloides, Polímeros
e Interfaces

julho de 2022

04 - 08 de julho de 2022, Ravena, Itália
Chemistry for Cultural Heritage (ChemCH-2020)
eventi.unibo.it/chemch2020

06 - 08 de julho de 2022, Málaga, Espanha
XXVII National Spectroscopy Meeting /
XI Iberian Spectroscopy Meeting
rne2022.com

10 - 15 de julho de 2022, Hiroshima, Japão
25th IUPAC International Conference on
Physical Organic Chemistry
icpoc25.jp

11 - 13 de julho de 2022, Rehovot, Israel
15th European Conference on
Research in Chemical Education
weizmann.ac.il/conferences/ECRICE2020

18 - 22 de julho de 2022, Estrasburgo, França
2nd International Conference on Noncovalent
Interactions 2021 (ICNI2021)
icni2021.unistra.fr

20 - 22 de julho de 2022, Roma, Itália
6th International Congress on Water,
Waste and Energy Management
waterwaste-20.com

20 - 22 de julho de 2022, Roma, Itália
5th International Conference on Green Chemistry
and Sustainable Engineering
greenchem-20.com

24 - 29 de julho de 2022, Lisboa, Portugal
XXII International Symposium
on Homogeneous Catalysis
xxii-ishc.events.chemistry.pt

25 - 27 de julho de 2022, Roma, Itália
2021 International Conference on
Materials and Nanomaterials
mns-20.com

27 - 29 de julho de 2022, Roma, Itália
2021 International Conference on Green
Energy and Environmental Technology
geet-2020.com

julho de 2022, Lisboa, *datas a anunciar*
Encontro do Grupo de Cristalografia e Escola
de Verão

agosto de 2022

08 - 10 de agosto de 2022, Kingston, Canadá
64th International Conference on Analytical
Sciences and Spectroscopy
csass.org/ICASS.html

28 de agosto - 01 de setembro de 2022,
Lisboa, Portugal
8th EuChemS Chemistry Congress
euchems2022.eu

setembro de 2022

setembro de 2022, Oeiras, *datas a anunciar*
Encontro do Grupo dos Glúcidos

setembro de 2022, *datas e local a anunciar*
Encontro da Divisão de
Química nas Ciências da Vida

outubro de 2022

23 - 26 de outubro de 2022, Nápoles, Itália
31st International Symposium on the Chemistry of
Natural Products e 11th International Congress on
Biodiversity (ISCP31 & IC0B11)
iscnp31-icob11.org

maio de 2023

Vilnius, Lituânia, *datas a anunciar*
13th International Conference on the
History of Chemistry (13ICHC)
ichc2021vilnius.chgf.vu.lt

agosto de 2023

Praga, República Checa, *datas a anunciar*
15th European Congress on Catalysis (EuropaCat)
europacat2021.cz

Eventos adiados (sem data definida)

Alcalá de Henares, Espanha
VII Jornadas Ibéricas de Fotoquímica
congresosalcala.fgua.es/jif2020

Belgrado, Sérvia
XXI European Food Chemistry
Congress (Euro Food Chem XXI)
horizon2020foodentwin.rs/sr/eurofoodchemxxi

Chalkidiki, Grécia
13th European Conference on Computational and
Theoretical Chemistry (EUCCO-CTC 2021)
[euchems.eu/divisions/computational-chemistry-2/
conferences](http://euchems.eu/divisions/computational-chemistry-2/conferences)

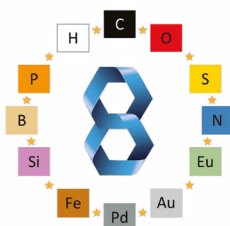
Atenas, Grécia
9th IUPAC International Conference on
Green Chemistry (ICGC-9)
greeniupac2020.org

Praga, República Checa
18th European Conference on Solid
State Chemistry (ECSSC2021)
ecssc18.com

Aveiro, Portugal
12th Ibero-American Congress on Sensors
ibersensor2021.events.chemistry.pt



14 - 16 de julho de 2021 - Braga



EuChemS

Chemistry Congress

28 August to 1 September
2022 · LISBON.PT

Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

www.spq.pt

janeiro-março
Vol. 45 | N.º 160 | 2021

Química



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA