

Boletim da Sociedade  
Portuguesa de Química

5,00 € - Distribuição  
gratuita aos sócios da SPQ

outubro-dezembro  
Vol. 48 | N.º 175 | 2024  
Publicação Trimestral

# Química

9898

2359

Química

Boletim da Sociedade Portuguesa de Química

outubro-dezembro | Vol. 48 | N.º 175 | 2024

Q





Editorial | 234

---

Direção | 235

---

Perspetiva

# 236

A Atividade do Centro de Formação da SPQ | 236

---

In Memoriam

# 238

Ana M. Lobo (1945-2024) | 238

---

Prémio Nobel da Química

# 239

Notícias | 246

---

Biografia

# 253

Júlio Máximo de Oliveira Pimentel (1809-1884), 2.º Visconde de Vila Maior | 253

---

Atualidades Científicas | 257

---

Ongoing

# 261

DeFend: Desferrização da Ataxia de Friedreich com Quelantes Inovadores Direcionados para a Mitocôndria | 261

---

Artigos

# 263

Quinonas Como Mediadores Redox Orgânicos em Baterias Redox de Caudal | 263

---

Estruturas Metal-orgânicas como Eletrocatalisadores para a Redução de CO<sub>2</sub> | 273

---

Economia Circular na Indústria Azul: Valorização do Óleo Resultante da Produção de Conserva de Atum | 280

---

Branca Edmée Marques, Primeira Catedrática de Ciências em Portugal - Apointamento Genealógico | 285

---

O Que Há de Novo no CLP? Novas Classes e Categorias de Perigo Introduzidos pelo Regulamento Delegado | 290

---

Nas Redes | 295

---

Química Entre Nós | 296

---

Espaço dos Mais Novos | 297

---

Destques | 301

---

Agenda | 303



O Prémio Nobel da Química de 2024 reconheceu avanços revolucionários que transformaram a compreensão da bioquímica e abriram novas fronteiras para aplicações nas áreas da medicina, da biotecnologia e da sustentabilidade ambiental. Os laureados deste ano foram homenageados pelas suas contribuições no campo do *design* computacional e na previsão de estruturas proteicas, utilizando ferramentas de inteligência artificial, atualmente cada vez mais omnipresentes em vários domínios.

David Baker, professor na Universidade de Washington, foi pioneiro no desenvolvimento de métodos computacionais que permitem criar novas proteínas. Estas estruturas desempenham funções

específicas, como combater doenças, desenvolver vacinas ou criar materiais com propriedades inovadoras. O trabalho de Baker representou um marco na bioengenharia, oferecendo soluções para desafios globais nas áreas da saúde e da indústria.

Demis Hassabis e John Jumper, investigadores da DeepMind, foram reconhecidos por desenvolverem o *AlphaFold2*, um modelo de inteligência artificial que resolveu o problema de previsão de estruturas tridimensionais de proteínas a partir das suas sequências de aminoácidos. Este feito permitiu avanços sem precedentes no domínio da biologia estrutural, tendo aberto também o caminho para a inovação em fármacos, diagnóstico precoce de doenças e tratamentos personalizados.

As contribuições dos laureados deste ano têm impactos significativos. No campo da medicina, o *design* de proteínas pode promover o desenvolvimento de terapias mais eficazes para diferentes tipos de cancro e doenças neurodegenerativas. Na biotecnologia, novas enzimas podem oferecer soluções sustentáveis para problemas ambientais, como a degradação de microplásticos ou o tratamento de águas residuais. Além disso, a previsão precisa das estruturas proteicas acelera significativamente o desenvolvimento científico, reduzindo custos e otimizando recursos. O Prémio Nobel da Química deste ano também demonstra a crescente importância da inteligência artificial na química e áreas afins. As ferramentas digitais não substituem a pesquisa experimental, mas permitem complementá-la e expandi-la. Convido o leitor a mergulhar um pouco mais neste tema através da leitura do artigo de Cláudio M. Soares e Diana Lousa sobre a atribuição do Prémio Nobel da Química de 2024.

Neste número, inauguramos uma nova secção do *Química* (Biografia). Homenageamos Júlio Máximo de Oliveira Pimentel, agraciado com o título de Visconde de Vila Maior, um dos mais completos homens de ciência em Portugal no século XIX. Entre outras funções e atividades, foi professor de química na Escola Politécnica e no Instituto Industrial, diretor do Instituto Agrícola, reitor da Universidade de Coimbra, divulgador científico com ligações estreitas ao mundo da indústria e especialista na área da enologia, além de deputado e par do reino, presidente da Câmara Municipal de Lisboa e membro do Conselho Geral do Comércio e Indústria e do Conselho de Saúde.

Homenageamos também Ana Lobo que nos deixou recentemente. Ana Lobo foi uma das protagonistas maiores da Química Orgânica em Portugal. Do seu vasto currículo, refira-se a causa à SPQ: foi coordenadora da Divisão de Química Orgânica (1992-1995), Presidente da Divisão de Química Orgânica (2005-2007) e cofundadora e a primeira diretora do Boletim da SPQ, entre 1978 e 1981.

Sendo o último número do ano, a equipa editorial do *Química* deseja a todos os sócios da SPQ e leitores do *Química* uma época natalícia de 2024 e um Ano de 2025 repleto de excelentes memórias.

&gt;

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 175, outubro-dezembro 2024

**REDAÇÃO, EDIÇÃO 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, Pedro S. F. Mendes, 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**

Sersilito, Empresa Gráfica, Lda.  
 Travessa Sá e Melo, 209, Apartado 1208  
 4480-116 Gueifães, Maia  
 +351 229 436 920  
 administracao@sersilito.pt  
 Tiragem: 1.400 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

# QUÍMICAS – Um Ciclo de Inspiração e Conhecimento

Em 2024, a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) deu início a um ciclo de conferências - QUÍMICAS - dedicado a celebrar o brilhantismo das mulheres no avanço da Química. Estas palestras, realizadas mensalmente em formato virtual e gratuito, ultrapassaram fronteiras, aproximando o público de histórias inspiradoras e avanços científicos transformadores.

A série de conferências teve início em abril, com Pilar Goya (Instituto de Química Médica, CSIC), a primeira mulher a presidir à EuChemS. Na palestra *Research Integrity: Good Scientific Practices*, Pilar destacou a importância da ética e das boas práticas na ciência, partilhando a sua trajetória pioneira na química medicinal a nível internacional.

Em maio, foi a vez de Zita Martins (Instituto Superior Técnico), astrobióloga de renome mundial, conduzir o público numa fascinante viagem pelo seu percurso académico e profissional. Em *Percurso académico e profissional de uma Astrobióloga: perspetivas e experiência*, Zita partilhou a sua paixão pela exploração espacial e o papel essencial da Química na procura de respostas sobre a origem da vida.

Já em julho, Mara Freire (Universidade de Aveiro) apresentou *Alicerces em Química. Investigação em Engenharia Química e Biotecnologia*. Com uma carreira marcada pela inovação, amplamente reconhecida a nível internacional, Mara compartilhou a sua vasta experiência, e revelou como a sua investigação em materiais biomédicos está a redefinir a Química aplicada à saúde.

Ainda em julho, Ana Cecília Roque (Nova School of Science & Technology), líder em biomimética, transportou o público para o fascinante universo da biomimética com a palestra *Biomimetic Systems for Functional Materials*. Nesta área, onde Química, Biotecnologia e Engenharia convergem, Ana Cecília demonstrou como criar soluções sustentáveis e revolucionárias inspiradas na natureza.

Em setembro, Ana Rita Ribeiro (Universidade do Porto) reconhecida pela sua investigação sobre o impacto ambiental dos fármacos e inovação em química analítica, apresentou a palestra *Na intersecção da saúde e do ambiente: um percurso com um denominador comum, os fármacos!*. Ana Rita explicou como a química analítica pode ser uma poderosa aliada na procura de um equilíbrio sustentável entre saúde e meio ambiente.

Já em outubro, Maria João Moreno (Universidade de Coimbra), especialista em química biofísica, desvendou, na palestra *Bioactive Molecules and Biomembranes: A Pathway to Predicting Drug Behavior in vivo*, os mecanismos que regem o comportamento dos fármacos no organismo. Esta abordagem multidisciplinar é essencial para o desenvolvimento de novos medicamentos e terapias.

Especialista em química medicinal, Maria Santos (Universidade de Lisboa) encerrou o ciclo de conferências para 2024, com a palestra *Derivados de indole no desenvolvimento de novos fármacos*. Trouxe uma visão fascinante de como a inovação em síntese orgânica pode impactar o desenvolvimento de novos



fármacos, abrindo caminhos para terapias mais eficazes.

Ao longo deste ano, cada sessão ofereceu uma oportunidade única de explorar os percursos e as contribuições de oito químicas, cujas carreiras extraordinárias ilustram o impacto da inovação na resposta a desafios globais. O ciclo QUÍMICAS continuará durante o primeiro semestre de 2025, encerrando com uma última conferência que terá lugar durante o XXIX Encontro Nacional da SPQ.

QUÍMICAS é mais do que uma homenagem às mulheres químicas: é um testemunho do papel essencial que desempenham no avanço do conhecimento e na construção de um futuro mais inclusivo e sustentável. Ao partilharem as suas histórias, estas mulheres inspiram as novas gerações a acreditar no poder transformador da Química.

A SPQ reafirma o seu compromisso de promover a igualdade de género e dar visibilidade às conquistas das mulheres na Química. Que este ciclo seja apenas o início de uma longa jornada de inspiração e reconhecimento. Porque a Química não conhece limites - apenas possibilidades.

Votos de Excelentes Festas!

>

**Luísa Margarida Martins**

Vice-presidente da Sociedade Portuguesa de Química  
luisammartins@tecnico.ulisboa.pt

# A Atividade do Centro de Formação da SPQ

>  
Tânia Coelho  
João Paulo Leal

## Formação e Divulgação da Química:

### Preparando Professores e Inspirando Alunos

A Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) é uma entidade com larga história e uma missão clara: promover, cultivar e desenvolver a investigação, o ensino e a aplicação da Química em Portugal. Desde a sua fundação em 1911, a SPQ tem sido um pilar fundamental na promoção da Química, tanto a nível académico quanto industrial, sublinhando a sua importância crucial no avanço científico e no desenvolvimento económico do país. Aliado a isso, a SPQ tem investido fortemente na formação contínua dos professores de Química, reconhecendo a importância de manter os professores atualizados com as mais recentes metodologias e conhecimentos científicos. Em 2018, foi criado o Centro de Formação de Professores, acreditado pelo Conselho Científico-Pedagógico da Formação Contínua. No Centro de Formação foram desenvolvidas uma série de ações de formação, umas delas feitas de modo autónomo e outras inseridas no âmbito de encontros promovidos pela SPQ, tais como:

- A Tabela Periódica: um Ícone na Centralidade da Química;
- Nomenclatura Química: Adequação das Regras da IUPAC à Língua Portuguesa;
- Conhecer a Luz para uma Cidadania Ativa;
- Humanidades, Artes e Ciências: A Transdisciplinaridade no Ensino da Química;
- Água: Recurso Circular para a Sustentabilidade;
- Ciências Básicas para um Desenvolvimento Sustentável;
- Motivar para a Aprendizagem da Química - Desafios Atuais;
- Química 4.0: Educar e Comunicar para a Inclusão e Literacia(s);
- Educação Química para o Desenvolvimento Sustentável.

Estas ações visam dotar os professores de ferramentas modernas e eficazes para o ensino da Química, promovendo a educação centrada no aluno e a utilização de tecnologias digitais.

No âmbito da divulgação da Química, a SPQ também se dedica a realizar palestras nas escolas, dinamizando sessões interativas que têm recebido *feedback* extremamente positivo de alunos e professores (ver abaixo). Nos últimos três anos letivos, destacaram-se as seguintes palestras:

- “Energias renováveis - Essas desconhecidas”, por João Paulo Leal, no Agrupamento de Escolas de Grândola;
- “A Química e os 17 ODS no âmbito do Ano Internacional das Ciências básicas para o desenvolvimento sustentável”, por Adelino Galvão e Jorge Parola, na Escola Secundária du Bocage;
- “Ética e desenvolvimento científico durante a segunda guerra mundial”, por João Paulo Leal, no Agrupamento de Escolas de Sousel (Figura 1);
- “A Química e os 17 ODS no âmbito do IYBSSD2023”, por Adelino Galvão, no Agrupamento de Escolas Pioneiros da Aviação Portuguesa;
- “Química e música com alunos do 12.º Ano - Química”, por Adelino Galvão, no Agrupamento de Escolas de Paço de Arcos;
- “O ciclo da água (versão ensino básico)”, por Adelino Galvão, no Agrupamento de Escolas Padre Alberto Neto;
- “Materiais Compósitos (turmas de Química do 12.º ano)”, por Adelino Galvão, no Agrupamento de Escolas Padre Alberto Neto;
- “Música e Arte: Casamento ou Divórcio”, por Adelino Galvão, no Agrupamento de Escolas de Seia;
- “A Química e os objetivos para o desenvolvimento sustentável”; por Adelino Galvão, no Instituto Politécnico de Tomar;
- “Drogas Sintéticas”, por João Paulo Leal, na Escola Básica e Secundária Prof. Ruy Luís Gomes;
- “A gota gotinha num ciclo que não tem fim”, por Adelino Galvão, na Escola Básica 2,3 Tourais/Paranhos;
- “Aprender química brincando com água”, por Adelino Galvão, na Escola Básica Dr. Abranches Ferrão;
- “Sustentabilidade”, por Adelino Galvão, na Escola Secundária Dr. Augusto César da Silva Ferreira;
- “Tabela Periódica”, por Adelino Galvão, na Escola Secundária do Forte da Casa (Figura 2);
- “Lítio e a viabilidade da sua exploração em Portugal | Tabela Periódica”, por Adelino Galvão, na Escola Secundária Jaime Cortesão;
- “Reações de ácido-base”, por Adelino Galvão, na Escola Básica n.º 2 de S. Silvestre (EB2,3).

### Testemunhos de professores que fizeram as formações

“A Ação foi mesmo muito interessante e contribuiu para a minha formação académica pessoal e também

contribuiu eficazmente para a melhoria da minha componente profissional.”

“Devem continuar a realizar formações de atualização de conhecimentos, fundamentais para nós, docentes.”

“Considero muito importante as ações da SPQ e devem ser divulgadas nas escolas.”

### Testemunho de alunos sobre as palestras

“Os alunos adoraram, consideraram que as atividades tinham sido muito interessantes e elucidativas. Gostaram essencialmente porque foi prática e abordou coisas do dia-a-dia. Consideraram o palestrante “muito inteligente”, bem-humorado e em todas as aulas perguntam quando é que ele volta.”

### O nosso empenho para o futuro

A Química é uma ciência central na nossa sociedade moderna, sendo crucial para a inovação e o desenvolvimento sustentável. Desde a produção de medicamentos até à criação de novos materiais, a Química está no coração de muitas das tecnologias que usamos diariamente. A compreensão e a aplicação da Química são fundamentais para enfrentar desafios globais, como a crise energética, a escassez de recursos e a necessidade de desenvolvimento sustentável. Por isso, é vital que continuemos a promover o ensino e a investigação nesta área, inspirando os jovens a seguir carreiras científicas e capacitando os professores para educar a próxima geração de químicos. Nesse sentido, a SPQ tem, para além das já citadas palestras, uma apresentação sobre a importância da Química na nossa vida e na sociedade em que vivemos.

Com o apoio dos seus sócios e formadores dedicados, está comprometida em continuar a promover a Química em Portugal, garantindo que mais pessoas compreendam e apreciem a importância desta ciência fascinante.

Através das suas iniciativas de formação e divulgação, a SPQ reafirma o seu compromisso em fortalecer a ciência química em Portugal, promovendo uma educação de qualidade que capacita os alunos a serem cidadãos informados e participantes ativos na construção de um futuro melhor.

Para mais informações sobre as ações de formação e eventos, visite o site da SPQ ou contacte o Centro de Formação da SPQ ([formacao@spq.pt](mailto:formacao@spq.pt)).

>

**Tânia Coelho**

[tania.coelho@spq.pt](mailto:tania.coelho@spq.pt)

>

**João Paulo Leal**

[jpleal@ctn.tecnico.ulisboa.pt](mailto:jpleal@ctn.tecnico.ulisboa.pt)



Figura 1 - “Ética e desenvolvimento científico durante a segunda guerra mundial”, João Paulo Leal, Agrupamento de Escolas de Sousel.



Figura 2 - “Tabela Periódica”, Adelino Galvão, Escola Secundária do Forte da Casa.



# Ana M. Lobo

## (1945–2024)

Nascida no Porto em 15 de novembro de 1945, veio muito nova para Lisboa. Ingressou no Instituto de Odivelas para fazer o curso liceal, tendo sido uma das alunas mais premiadas, permanecendo sempre no Quadro de Honra. Licenciou-se em 1967 com a nota final de 18 valores em Ciências Físico-Químicas pela FCUL. Como bolsista da Fundação Calouste Gulbenkian, obteve o grau de Doutor em Química no Departamento de Química do *Imperial College of Science and Technology* de Londres, em 1971, com a tese intitulada *Ring Cleavage of Oxaziridines*. Em 1972 fez um pós-doutoramento com Sir Derek H. R. Barton (Prémio Nobel da Química em 1969), também como bolsista da Fundação Calouste Gulbenkian com um trabalho de investigação sobre biossíntese de alcaloides eritrínicos.

No regresso a Portugal, trabalhou inicialmente no Laboratório de Farmacologia do Centro de Biologia da Fundação Gulbenkian em Oeiras (1972–1974), como bolsista do Instituto de Alta Cultura, orientando estagiários de diversas universidades portuguesas.

Ingressou depois na recém-criada Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova da Lisboa (FCT-UNL), ainda instalada no Seminário dos Olivais, como professora auxiliar (1974), tendo depois ascendido a professora agregada em Química Orgânica (1978), professora catedrática (1979) e professora catedrática de nomeação definitiva (1981).

Exerceu os cargos de Presidente do Conselho Científico da FCT-UNL, Presidente da Comissão Pedagógica para a Licenciatura em Química Aplicada (1981–1985, 1987–1989) e Coordenadora da Secção de Química Orgânica (1985–1989, 1991–1995, 1999–2008). Exerceu as funções de Decana da UNL e da sua FCT-UNL desde 2010 até 15/11/2015, altura em que se jubilou.

A Professora Ana Lobo dedicou a sua vida profissional ao ensino e à investigação, em colaboração com o Professor Sundaresan Prabhakar, seu colega e esposo. Foi uma das responsáveis pela criação da Licenciatura em Química Aplicada e do Mestrado em Química Orgânica Tecnológica, este em colaboração com o então Laboratório Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial (LNETI) em 1984–2008. Supervisionou ou co-supervisionou 30 doutoramentos e três mestrados na área da química orgânica.

Os seus interesses de investigação incluíram mecanismos de química e biorgânica, desenvolvimento de novos reagentes sintéticos, determinação de estruturas de produtos naturais incluindo produtos do pinheiro e produtos marinhos da plataforma oceânica portuguesa, e mecanismos bioquímicos como a carcinogénese química. Interessou-se pelo desenvolvimento de novas ferramentas



e metodologias para o ensino de química a estudantes cegos, do que resultou o *NavMol*, um editor molecular para alunos cegos e de baixa visão que permite navegar numa molécula de átomo em átomo.

Foi autora e coautora de mais de 130 publicações científicas, várias patentes de química e três livros sobre temas vários de química orgânica. Traduziu para português vários livros de interesse didático para o ensino da química.

Era sócia da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e foi cofundadora e a primeira diretora do Boletim da SPQ (1978–1981). Posteriormente, foi coordenadora da Divisão de Química Orgânica da SPQ (1992–1995) e Presidente da Divisão de Química Orgânica da SPQ (2005–2007). Foi também distinguida como *Fellow of the Royal Society of Chemistry* (London) (2014). O seu nome foi atribuído a um laboratório de investigação de química orgânica da FCT-UNL (12/10/2016), onde manteve a atividade de investigação após a jubilação em 2015.

Proferiu inúmeras palestras sobre química em diferentes países, fez parte dos conselhos editoriais de diversas revistas científicas nacionais e estrangeiras, integrou comités de avaliação de projetos de investigação e de bolsas e foi membro de numerosos júris em Portugal e no estrangeiro. Recebeu o prémio Estímulo à Ciência 2004 do Ministério da Ciência, Inovação e Ensino Superior.

Interessada pela problemática da Mulher na Ciência, foi membro fundador da AMONET - Associação Portuguesa de Mulheres Cientistas, em 2004, tendo sido a sua primeira Presidente. Entre 2007 e 2015 foi Vice-presidente da AMONET e também foi, de 2013 a 2015, membro do Conselho de Administração da Plataforma Europeia de Mulheres Cientistas (EPWS) com sede em Bruxelas. Foi homenageada com o Prémio Municipal Beatriz Ângelo 2019 pela Câmara Municipal de Odivelas por se ter destacado na promoção da igualdade de género.

Possuidora de um *curriculum* excepcional, foi verdadeiramente a mãe da Química Orgânica em Portugal.

>

**Vasco Bonifácio**

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt



# Design de Proteínas e a Previsão da sua Estrutura – O Prémio Nobel da Química 2024, atribuído a David Baker, Demis Hassabis e John Jumper

## O Prémio Nobel da Química 2024

Em 2024 o comité Nobel decidiu atribuir dois Prémios Nobel, o da Física e o da Química, a avanços científicos e tecnológicos dependentes da Inteligência Artificial e outros métodos computacionais. O que pode ser considerado, possivelmente, um sinal dos tempos. Enquanto o Prémio Nobel da Física, atribuído a John J. Hopfield (*Princeton University*) e a Geoffrey Hinton (*University of Toronto*), foi mesmo sobre redes neuronais, o Prémio Nobel da Química, atribuído a David Baker (*University of Washington*), Demis Hassabis e John Jumper (ambos da *Google DeepMind*), consagrou, em certa medida, o impacto da Inteligência Artificial e das redes neuronais nos enormes desenvolvimentos no campo no *design* de proteínas e na previsão da sua estrutura tridimensional.



David Baker

Demis Hassabis

John Jumper

Ill. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

Como se poderá ver em seguida, os desenvolvimentos que deram origem ao Prémio Nobel da Química 2024 estão muito relacionados. David Baker recebeu metade do Prémio Nobel pelos desenvolvimentos em *design* de proteínas, enquanto Demis Hassabis e John Jumper receberam a outra metade do mesmo Prémio pela previsão da estrutura de proteínas. Por uma razão de perspectiva histórica e de clareza conceptual, falar-se-á primeiro sobre a previsão da estrutura de proteínas e só depois sobre o *design* de proteínas.

## Previsão de estrutura de proteínas

As proteínas, as máquinas da vida, têm, na maioria dos casos, uma estrutura predominante definida, que é determinante para a sua função. A busca desta estrutura tridimensional, ou seja, a organização espacial de todos os átomos que as constituem, é uma investigação de longa data. Esta pesquisa tem dois aspetos: (i) compreender como uma proteína sintetizada por um ribossoma adquire a sua forma, ou seja, qual o caminho que segue, desde uma cadeia

de resíduos de aminoácidos até à sua forma final (ou mais provável), ou (ii) qual é a forma final da estrutura da proteína, independentemente do caminho para lá chegar. Poder-se ia pensar que os dois aspetos são semelhantes, mas o primeiro, que contém o segundo, é muito mais difícil.

A primeira proteína que teve a sua estrutura resolvida a uma resolução quase atómica (2 Å) foi a mioglobina (Figura 1), uma proteína composta por 153 resíduos de aminoácidos e contendo um grupo heme, que existe no citoplasma das células do músculo dos vertebrados e fixa oxigénio, necessário à respiração celular. Esta estrutura foi determinada por John Kendrew e colaboradores em 1960 [1], usando cristalografia por difração de raios-X e a sua determinação representou um feito espantoso para a época, garantindo a Kendrew o Nobel da Química de 1962, laureado conjuntamente com Max Perutz.

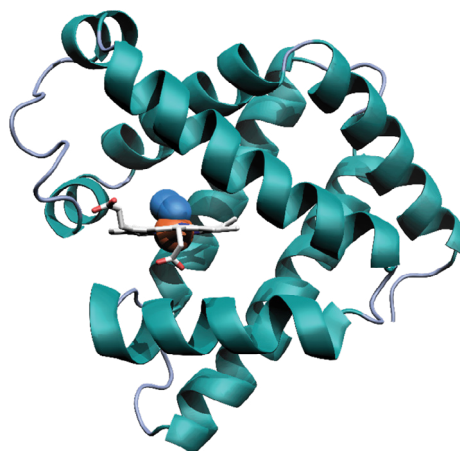


Figura 1 - Estrutura da mioglobina determinada usando cristalografia por difração de raios-X. Nesta figura molecular gerada usando o software PyMOL [2] a partir das coordenadas depositadas no PDB (código PDB: 1MBO [3]), a estrutura secundária da mioglobina está retratada usando uma representação denominada *cartoon* e colorida a verde, os átomos do grupo heme que coordenam o átomo de ferro estão representados usando *sticks* brancos, o átomo de ferro está representado usando uma esfera laranja e a molécula de oxigénio (O<sub>2</sub>) está representada usando esferas azuis.

A determinação da estrutura da mioglobina por John Kendrew e colaboradores exigiu muitos anos de dedicação e foi um processo laborioso. Desde então as metodologias evoluíram e é possível determinar a estrutura de proteínas e outras biomoléculas usando cristalografia por difração de raios-X (*X-ray*), ressonância magnética nuclear (NMR) multidimensional e, mais recentemente, Crio-microscopia eletrónica (Cryo-EM). O repositório de estruturas experimentais de biomoléculas

(PDB – *Protein Data Bank*) tem hoje (30 de novembro de 2024) 227933 estruturas diferentes. Apesar de terem existido muitos avanços técnicos neste campo, determinar a estrutura de uma biomolécula continua a ser um esforço laborioso, requer conhecimentos especializados e instrumentação dispendiosa.

Assim, um dos grandes objetivos da Biologia Estrutural, a par com o desejo de desenvolver métodos experimentais cada vez mais eficientes na determinação da estrutura, sempre foi encontrar um meio para prever a estrutura tridimensional de proteínas (e outras biomoléculas) com base no conhecimento da sua sequência primária, ou seja, a sequência de resíduos de aminoácidos que a constituem.

As primeiras tentativas de prever a estrutura de proteínas vieram da aplicação do campo da Mecânica Molecular, usando funções de energia potencial empíricas. Estas metodologias, que eram inicialmente usadas para estudar a conformação de moléculas pequenas, começaram a ser aplicadas a pequenas proteínas, sendo de salientar os trabalhos pioneiros de Gibson & Sheraga 1967 [4], Levitt & Warshel [5], que usaram grandes aproximações para permitir estudar sistemas tão complexos. No entanto, o problema revelou-se muito desafiante, mesmo com o surgimento de computadores cada vez mais rápidos.

Os impressionantes avanços computacionais (quer ao nível da capacidade de cálculo do *hardware*, quer ao nível da eficiência do *software*) permitiram idealizar que seria possível simular as alterações conformacionais das cadeias polipeptídicas a partir de uma conformação não enrolada, com o objetivo de se reconstruir o processo de adquirir estrutura enrolada usando métodos de mecânica molecular, em particular a simulação de dinâmica molecular. Este objetivo esteve na cabeça de inúmeros investigadores, mas os primeiros que conseguiram simular este processo complexo de uma maneira verdadeiramente global foram Duan & Kolmann em 1998 [6] que, usando um supercomputador, simularam a *Villin headpiece subdomain*, um polipéptido de 36 resíduos de aminoácidos, durante 1  $\mu$ s ( $1 \times 10^{-6}$  s). Este tempo de simulação para uma proteína em solvente explícito (aproximadamente 3000 moléculas de água) foi algo inaudito na altura e só por si consistiu num feito tecnológico. No entanto, embora se tenha observado a formação de estrutura secundária, a conformação final da proteína era consideravelmente diferente da estrutura obtida por NMR. Este feito suscitou grande entusiasmo na comunidade científica (incluindo dos autores), mas os recursos computacionais necessários para atingir este resultado (para não falar das longas simulações que seriam necessárias para se observar o *folding* de proteínas um pouco maiores ou mais complexas), estavam e estão apenas ao alcance de poucos. Muitos estudos foram feitos, até que um competidor inusitado entrou nesta corrida:

David E. Shaw, um cientista computacional, que se transformou em financeiro computacional (e em bilionário) e mais tarde voltou à ciência, desta vez como Bioquímico Computacional. Em 2010, Shaw e os seus colaboradores (incluindo um dos premiados com o Nobel deste ano, John Jumper) publicaram um artigo em que reportaram o *folding* de diversas proteínas, usando simulações muito longas para a época, alcançando a escala do milissegundo ( $1 \times 10^{-3}$  s) [7]. Estes estudos basearam-se num avanço tecnológico notável, a construção de um computador, denominado Anton [8], construído especificamente para fazer simulações de dinâmica molecular (e não sendo de uso geral, como a maioria dos computadores). David E. Shaw usou a sua vasta fortuna para construir o Anton e criou um instituto de investigação para fazer estes estudos, supervisionado e financiado por ele, o D. E. Shaw Research, LLC. Não há muitos *Anton* no planeta e o comum dos mortais não tem acesso a estas máquinas, mas é uma questão de esperar que os computadores se tornem mais rápidos para que esta metodologia, que não só prevê estrutura, mas também o caminho de *folding*, se possa generalizar. De qualquer forma, este sucesso mostra que, contrariamente ao que é veiculado, conhecemos os fatores que determinam o *fold* de proteínas sem alterações pós-traducionais: são a sequência e a física molecular introduzida nas funções de energia potencial. O fator limitante é unicamente computacional.

Dado que prever a estrutura de uma proteína não passa necessariamente por conhecer o caminho através do qual esta estrutura é adquirida, desde cedo surgiram estratégias alternativas para inferir a estrutura de uma proteína a partir da sua sequência. Uma das possibilidades exploradas para “construir” a estrutura de uma proteína com base noutra foi tirar partido da homologia entre sequências de proteínas conhecidas. Tal foi feito pela primeira vez por Browne e colaboradores [9], que previram a estrutura da alfa-lactalbumina a partir da estrutura experimental da lisozima, com base em modelos físicos (construídos com arames, literalmente). Este trabalho abriu o caminho para o campo da modelação por homologia (ou modelação comparativa), que, mais tarde, se tornou computacional. Nesta metodologia, usa-se a estrutura de uma (ou várias) proteínas, para prever a estrutura de outra proteína homóloga, considerando as estruturas experimentais, o alinhamento de sequências e mecânica molecular. Vários investigadores dedicaram-se a desenvolver *software* e métodos para fazer modelação por homologia, mas os mais sucedidos e continuados esforços foram feitos no laboratório de Tom L. Blundell, inicialmente por Mike Sutcliffe [10] (*Composer*) e depois por Andrei Sali [11], que escreveu o mais difundido e sólido *software: Modeller*. Durante longos anos, a modelação por homologia foi a metodologia rainha na previsão de estrutura de proteínas, originando grandes avanços no seu conhecimento estrutural, uma vez que

muitas sequências homólogas de proteínas, facilmente obtidas por sequenciamento genômico, podiam dar origem a previsões da estrutura tridimensional dessas proteínas, desde que houvesse no PDB uma estrutura com uma suficiente identidade sequencial (30-40%) para servir de “molde”. É especulado que o PDB contém já a maioria das formas naturais possíveis das proteínas, pelo que, para a maioria dos casos, a aplicação de modelação por homologia era possível, muito embora muitos modelos pudessem ter erros significativos e, em muitos casos, se observassem desvios significativos das estruturas modeladas quando estas eram comparadas com a estrutura da mesma proteína determinada experimentalmente. Este problema é tanto mais severo, quanto menor a homologia entre a proteína “alvo” e a proteína “molde”. Para piorar a situação, há numerosos casos em que nenhum homólogo da proteína cuja estrutura se quer prever se encontra no PDB. O que fazer nestes casos?

Para estes casos restavam as metodologias de previsão denominadas *ab initio*, onde nenhuma informação experimental explícita era utilizada. As metodologias de Mecânica Molecular, já referidas acima, eram muito utilizadas na previsão *ab initio*, mas o campo evoluía lentamente, embora David Baker, um dos destinatários do Prémio Nobel de 2024, fosse uma das estrelas do CASP (*Critical Assessment of Protein Structure Prediction*), a competição de previsão de estrutura de proteínas criada por John Moult e colaboradores em 1994 [12]. O laboratório de David Baker criou o *software* ROSETTA [13] que, entre outras funcionalidades, previa estruturas de proteínas com base em fragmentos.

Devemos fazer aqui um parêntesis para referir um outro fator determinante para as previsões de estruturas modernas: os alinhamentos múltiplos de sequências (MSA – *Multiple Sequence Alignments*). Um alinhamento de múltiplas sequências de proteínas homólogas permite identificar sinais de correlação de mutações, que nos contam a história evolutiva das proteínas. Se a mutação de dois resíduos de aminoácido ocorre de forma correlacionada, é possível (mas não é determinístico) que esses dois resíduos estejam em contacto na estrutura das proteínas da família analisada. Esta correlação foi formalizada inicialmente por Chris Sander e colaboradores [14], e tornou-se um fator importante naquilo que veio muito mais tarde. E o que veio a seguir dependeu também da enorme informação que hoje temos sobre sequências primárias de proteínas, resultante da sequenciamento massiva (e pouco dispendiosa) de genomas e meta-genomas.

Agora que já conhecemos a paisagem complexa da previsão da estrutura de proteínas e a forma como esta paisagem evolui ao longo do tempo, é o tempo para fazermos um *fast-forward* para parte do Prémio Nobel de 2024: os desenvolvimentos que levaram a grandes avanços nas metodologias de previsão de estrutura. No

CASP13, em 2018, apareceu um grupo da DeepMind, empresa subsidiária da Google, que apresentou um *software*, baseado em redes neuronais que, para além de bater toda a competição, atingiu quase uma *Global Distance Test* de 60 (ver Figura 2) – muito aumentada em relação à mais bem obtida no CASP12, de cerca de 40. Este *software* foi denominado AlphaFold e mostrou as potencialidades da inteligência artificial e do *deep learning* na previsão da estrutura de proteínas [15]. No CASP14, em 2020, uma versão redesenhada da rede neuronal original, designada AlphaFold2 [16], bateu toda a competição, alcançando um valor de cerca de 90 GDT (Figura 2), comparável com métodos experimentais de previsão de estrutura de proteínas. Parte do segredo desta nova versão do AlphaFold foi ter tirado partido dos novos desenvolvimentos no campo da inteligência artificial e de uma nova abordagem conhecida como “mecanismos de atenção” que é muito mais poderosa do que as anteriores a encontrar relações globais e não apenas relações mais locais entre os elementos de um sistema. No caso da previsão de estrutura de proteínas, este fator é muito importante, porque a estrutura final depende de um conjunto enorme de interações entre resíduos, alguns dos quais estão muito distantes em termos de sequência primária. O mundo da biologia estrutural mudou nesse dia e foi isso que foi reconhecido em metade do Prémio Nobel da Química de 2024, consagrando Demis Hassabis e John Jumper.

Os modelos AlphaFold (já estamos neste momento no AlphaFold3 [17]), são baseados em *deep neuronal networks* treinadas nas estruturas existentes no PDB e também usam para a previsão a informação de correlações obtidas no MSA de sequências homólogas

#### Median Free-Modelling Accuracy



Figura 2 – Evolução da medida *Global Distance Test* (GDT) ao longo de sucessivas edições do concurso CASP. O valor de GDT, que varia de 0 a 100, é uma medida da percentagem de resíduos de aminoácido que estão abaixo de um valor limite de distância em relação à sua posição correta, sendo um valor de 90 indicativo de que a previsão é comparável aos resultados obtidos por métodos experimentais. As

barras correspondem ao valor médio obtido pela equipa vencedora de cada edição considerando os cinco casos em que obtiveram as melhores previsões. A barra a roxo evidencia o aumento substancial obtido pela primeira versão do AlphaFold e a barra a azul mostra os resultados impressionantes obtidos pela segunda versão do AlphaFold – AlphaFold2 (extraído de [deepmind.com/blog/article/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology](https://deepmind.com/blog/article/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology)).

da proteína que se quer prever (Figura 3), sendo possível o uso de estruturas experimentais de proteínas homólogas para aumentar a confiança do modelo.

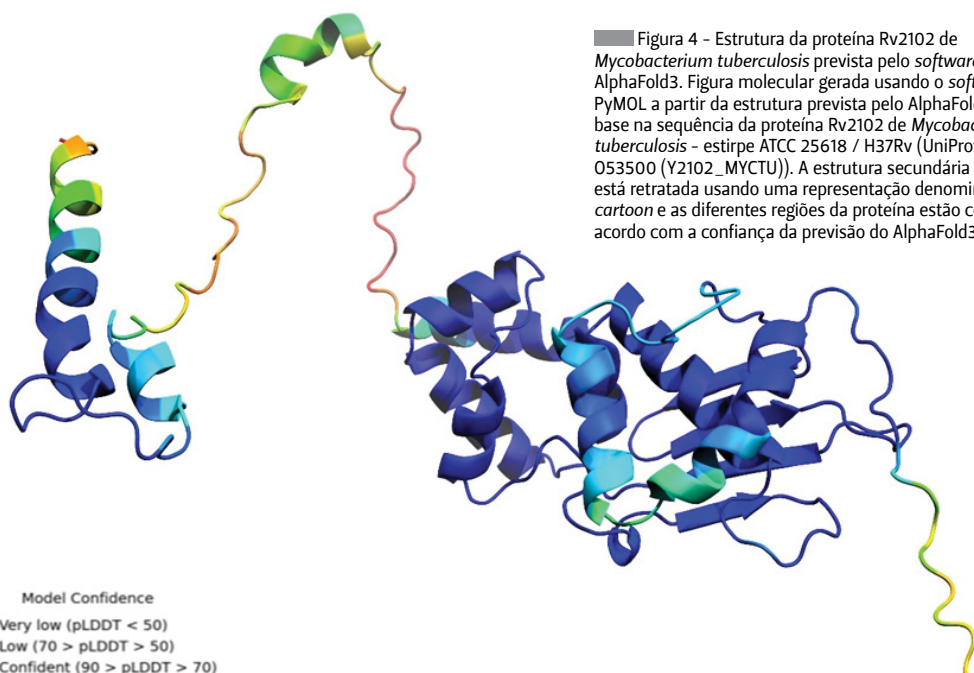
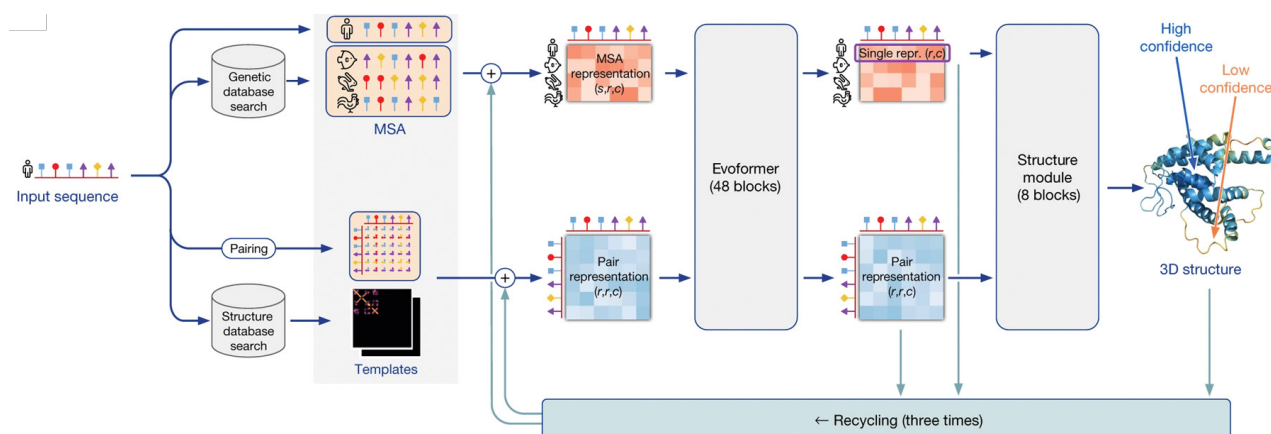
Agora, é possível prever a estrutura de qualquer proteína, seja homóloga ou não com uma proteína cuja estrutura tenha sido determinada anteriormente. Um exemplo encontra-se na Figura 4, onde a proteína Rv2102 de *Mycobacterium tuberculosis*, que não tem homologia sequencial com nenhuma proteína de estrutura experimentalmente conhecida, é prevista pelo AlphaFold3.

Os modelos AlphaFold não só permitem a previsão de estruturas de proteínas, mas também permitem

obter uma medida, global e local, de qualidade dessas estruturas. O caso da proteína Rv2102 dá-nos uma imagem clara disso mesmo, já que algumas regiões (coloridas a azul) apresentam uma grande confiança, enquanto outras regiões (coloridas a amarelo e a laranja) apresentam baixa confiança. Esta baixa confiança pode ser consequência de limitações do modelo (não nos esqueçamos que o modelo é treinado em dados conhecidos e que depende parcialmente do MSA) ou corresponder a zonas desordenadas da proteína. Ainda há muito caminho a percorrer para se conhecerem todas as características das proteínas, mas o primeiro passo determinante foi dado.

■ Figura 3 - Arquitetura do software AlphaFold 2. Este software recebe como *input* a sequência de uma proteína cuja estrutura se pretende determinar e a partir desta gera um alinhamento múltiplo de seqüências (MSA). O software usa então dois tipos de representação: o MSA e uma "representação de pares", podendo também usar informação contida em estruturas conhecidas de proteínas homólogas. Seguidamente, o módulo principal do software,

designado "Evoformer", usa uma rede neuronal profunda para refinar informação do MSA e da representação de pares. O módulo final, chamado "Structure Module", mapeia as representações refinadas do MSA e de pares em coordenadas tridimensionais da proteína. O processo é iterado várias vezes, de forma a diminuir o ruído e aumentar a confiança da estrutura prevista. Esta figura foi reproduzida da referência [16].



■ Figura 4 - Estrutura da proteína Rv2102 de *Mycobacterium tuberculosis* prevista pelo software AlphaFold3. Figura molecular gerada usando o software PyMOL a partir da estrutura prevista pelo AlphaFold3 com base na sequência da proteína Rv2102 de *Mycobacterium tuberculosis* - estirpe ATCC 25618 / H37Rv (UniProtKB - O53500 (Y2102\_MYCTU)). A estrutura secundária da proteína está retratada usando uma representação denominada *cartoon* e as diferentes regiões da proteína estão coloridas de acordo com a confiança da previsão do AlphaFold3.

### Design de proteínas

A outra face do prêmio Nobel da Química de 2024 é também a outra face do problema descrito acima. Se a previsão de estrutura tem como objetivo determinar a estrutura de uma proteína a partir da sequência, a outra face desta moeda, conhecida como desenho de proteínas, tem como objetivo criar uma sequência de resíduos de aminoácido que seja capaz de adotar uma estrutura desejada e realizar uma função pretendida. Criar novas proteínas para tratar doenças como o cancro, defender-nos de vírus e bactérias ou degradar poluentes como o plástico, parece ficção, mas é hoje possível graças a esta área da biologia estrutural.

David Baker recebeu parte do Prêmio Nobel da Química pelos avanços em desenho de proteínas, dado que teve o mais sólido e continuado trabalho no campo (assim como referido acima, na previsão de estrutura de proteínas). Mas não foi o pioneiro. O primeiro esforço consistente reportado neste campo foi feito por Regan & DeGrado em 1988 [18], quando desenharam e produziram experimentalmente uma proteína não natural com quatro hélices alfa. Embora um feito para a altura, o desenho desta proteína não foi propriamente computacional. O primeiro esforço computacional foi feito Dahiyat & Mayo em 1997 [19], que desenharam uma proteína com a forma de um *zinc finger*, mas sem os resíduos de aminoácidos para ligar o íon zinco, nem o zinco (Figura 5). De notar que não existem proteínas naturais conhecidas que adotem este *fold* na ausência de um átomo de zinco que estabilize a estrutura, tendo sido, por isso, um feito criar uma proteína que adota esta arquitetura sem necessitar da ligação ao zinco.

Dahiyat & Mayo fixaram a cadeia principal do *zinc finger* e pesquisaram combinações de resíduos e conformações de cadeias laterais para otimizar a rede de interações moleculares, usando modelos físicos para classificar a qualidade de cada uma das proteínas geradas, proibindo a inclusão de resíduos de cisteína e histidina nos locais que coordenam o íon zinco. A proteína desenhada foi sintetizada e a sua estrutura foi determinada por NMR, evidenciando uma forma muito semelhante ao do *zinc finger* original.

Mas foi David Baker, recipiente de parte do Prêmio Nobel da Química de 2024, que deu os passos mais arrojados e consistentes no campo do desenho de proteínas. Em 2003, Baker e colaboradores publicaram uma estrutura com uma topologia não vista na Natureza [20], a proteína Top7 (Figura 6), desenhada pelo *software* ROSETTA. Quando a estrutura desta proteína foi determinada experimentalmente, verificou-se que era muito similar ao modelo previsto e otimizado pelos métodos de Mecânica Molecular implementados no ROSETTA e pelo resultado da pesquisa massiva de sequências executada por este *software*.

Mais recentemente, os avanços no campo da inteli-

Figura 5 - Comparação da estruturas experimentais de um domínio *zinc finger* nativo com um domínio desenhado para adquirir o mesmo *fold* na ausência de zinco. A figura mostra o segundo domínio de *zinc finger* da proteína (PDB 1zaa) – em cima, e uma proteína desenhada por Dahiyat e Mayo para adquirir a mesma forma, mas que não contém os resíduos de aminoácidos necessários para ligar o íon zinco (PDB 1fsd) – em baixo. As figuras moleculares foram geradas usando o *software* PyMOL, sendo a estrutura secundária das proteínas retratada usando uma representação denominada *cartoon* colorida a laranja. As cadeias laterais dos resíduos que compõem as proteínas estão representadas usando *sticks*, com os átomos de carbono, oxigénio e nitrogénio coloridos a laranja, vermelho e azul, respetivamente.

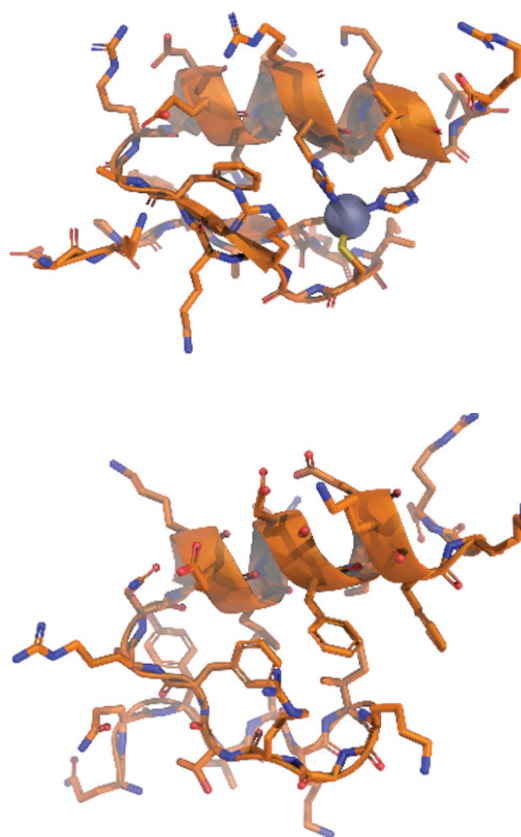
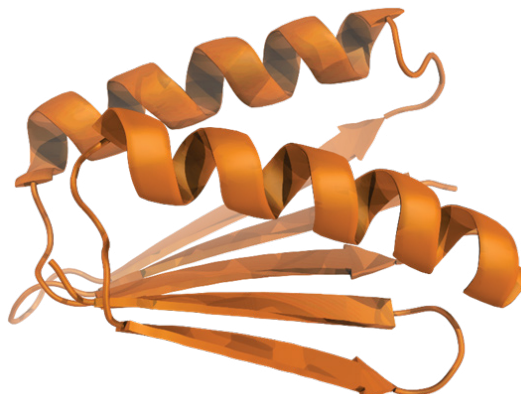


Figura 6 - Estrutura da proteína Top7 desenhada pelo laboratório de David Baker usando o *software* ROSETTA. A figura molecular foi gerada usando o *software* PyMOL a partir da estrutura experimental depositada no PDB (PDB 1QYS), sendo a estrutura secundária retratada usando uma representação denominada *cartoon* colorida a laranja.



gência artificial (IA) também mudaram a forma como se faz desenho de proteínas. Entre os métodos de IA mais usados nesta área, encontram-se duas ferramentas desenvolvidas no laboratório de David Baker: *RF diffusion* [21] e *Protein MPNN* [22]. Estas duas ferramentas são complementares entre si e são usadas em diferentes etapas do processo de *design*. Numa primeira etapa, o *RF diffusion* é usado para gerar um esqueleto da proteína que tenha a estrutura desejada. Se o objetivo for desenhar uma proteína que possa encaixar-se bem numa outra proteína alvo, esta ferramenta irá gerar uma estrutura tridimensional que tenha um bom encaixe geométrico com o alvo. Para isso, usa uma abordagem semelhante à que é usada para criar imagens em servidores como o DALL-E, mas, neste caso, usa-se esta abordagem para gerar o esqueleto da estrutura tridimensional de uma proteína. O *RF diffusion* é um modelo generativo (gera estruturas) baseado numa técnica que é conhecida como difusão. O processo, que quase parece magia, começa por gerar uma forma tridimensional muito mal definida e cheia de ruído, que se vai moldando numa proteína com a forma pretendida à medida que o ruído é progressivamente removido usando uma rede neuronal muito poderosa, que foi treinada com estruturas reais depositadas no PDB. No final deste processo obtém-se uma proteína que tem a forma ideal para o propósito que temos em mente, que pode ser, por exemplo, ligar-se a uma proteína alvo.

Um ponto interessante desta metodologia é que a solução que obtemos não é ainda a solução final, porque o *RF diffusion* gera apenas o esqueleto da nossa proteína, colocando resíduos de glicina em todas as posições da sequência. Podemos fazer uma analogia com a construção de uma casa: temos os alicerces, mas precisamos de construir as paredes e todo o recheio, ou seja, precisamos de preencher todas as posições da nossa sequência. Para isso, precisamos de um método robusto que consiga prever quais são os resíduos mais adequados para cada posição. No final de contas, precisamos de desenhar a sequência certa que dará origem à estrutura tridimensional que acabámos de gerar no passo anterior. Um dos métodos mais usados para este fim é o *Protein MPNN*, que usa uma rede neuronal profunda, dividida em dois módulos principais. O primeiro módulo, chamado “codificador da estrutura do esqueleto da proteína”, codifica a estrutura que recebeu como *input* e transforma-a numa espécie de mapa que contém informação sobre como os resíduos da proteína interagem uns com os outros. O segundo módulo, chamado “descodificador da sequência” é responsável por gerar uma sequência compatível com a estrutura do esqueleto da proteína que foi codificada pelo primeiro módulo. Para cada posição, a rede neuronal prevê as probabilidades para cada um dos 20 resíduos de aminoácido possíveis e, com base nas probabilidades previstas, seleciona um resíduo para uma dada posição. Isto é feito de forma iterativa e aleatória (a ordem de previsão ao longo

da cadeia não é fixa) e o processo só termina quando toda a sequência está preenchida. Uma vez que se trata de um modelo probabilístico e estocástico, pode gerar soluções diferentes para o mesmo esqueleto de proteína. Muitas vezes, nas campanhas de *design* de proteínas são geradas milhares de sequências com esta ferramenta, sendo seguidamente selecionadas as melhores com base em propriedades, definidas pelos investigadores, que sejam indicativas de uma alta probabilidade de sucesso. Tal como acontecia nas campanhas de *design* baseadas em métodos “físicos” como o ROSETTA, as sequências das proteínas desenhadas são depois transformadas em sequências de DNA que as codificam e que são otimizadas para permitirem uma expressão eficiente no organismo escolhido para as produzir.

Nos projetos internacionais BioPlATTAR e EvaMobs que coordenamos, usamos estratégias semelhantes à que foi descrita acima para desenhar proteínas com uma forma otimizada para bloquear a superfície dos vírus de modo a impedir a sua entrada nas nossas células, e consequentemente a infeção. Como podemos criar proteínas específicas para diferentes alvos, esta estratégia pode ser aplicada a uma panóplia de doenças e permitir-nos combater futuras pandemias e outros flagelos. Um exemplo pode ser apreciado na Figura 7, onde apresentamos um *design* de uma proteína helicoidal que liga ao RBD (*Receptor Binding Domain*) da proteína-S do vírus SARS-CoV-2.

### O que nos espera o futuro?

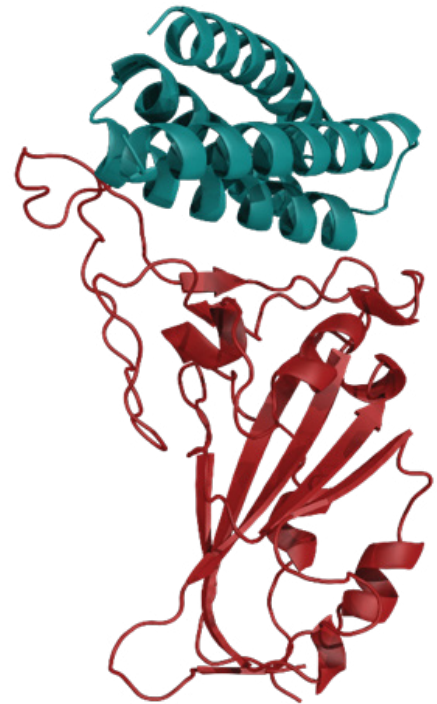
Os avanços em inteligência artificial estão a mudar a face da ciência e também da sociedade, numa acelerada revolução, com características ímpares. É de esperar o surgimento de novas metodologias que permitam ir ainda mais além na previsão da estrutura de proteínas e outras biomoléculas, assim como no seu desenho. Essas metodologias serão, possivelmente, um misto entre inteligência artificial e modelos físicos, combinando o melhor dos dois mundos. O futuro será um lugar interessante e a Biologia é a Engenharia do século XXI.

Mas existem desafios que precisamos de enfrentar. A inteligência artificial, tradicionalmente um campo académico exótico, tornou-se recentemente uma corrente dominante do desenvolvimento tecnológico, dominada por empresas, dado que a maioria dos académicos (e mesmo as empresas de menores dimensões) não têm recursos computacionais suficientes para treinar modelos de inteligência artificial de última geração. É aqui importante notar que esta situação levanta ainda mais questões pelo facto de iniciativas como o AlphaFold deverem a sua existência ao enorme investimento público que resultou na obtenção dos grandes dados que foram usados para treinar estes métodos. Podemos dizer que estes avanços, embora tenham sido implementados por empresas privadas, foram

alimentados por dinheiro público.

O uso de dados públicos sem garantido retorno público e a desigualdade de recursos, quer na academia quer nas SMEs, em relação aos gigantes tecnológicos, podem ser perniciosos para a inovação. Não é por acaso que o AlphaFold e dois dos laureados de 2024 (Demis Hassabis e John Jumper) pertencem a uma empresa subsidiária de uma das maiores empresas mundiais, com recursos de ordens de grandeza superiores às mais ricas Universidades e Instituições sem fins lucrativos. Naturalmente, as empresas quererão capitalizar os seus investimentos, mas o setor público necessita de encontrar maneiras de potenciar o desenvolvimento tecnológico nestas áreas e ocupar o seu devido lugar no ecossistema de inovação – no futuro das coisas inauditas e cuja aplicabilidade é ainda desconhecida. Cabe também à ciência o papel de não querer apenas ter bolas de cristal que nos permitam fazer previsões e criar proteínas, mas também de gerar novo conhecimento a partir destes métodos e de tornar os seus resultados interpretáveis, passíveis de ser apreendidos pela mente humana e explorados para o desenvolvimento das sociedades humanas.

Figura 7 - Estrutura de uma mini-proteína helicoidal (representada em *cartoon* verde) criada usando uma estratégia de *design* computacional baseada nas ferramentas *RF diffusion* e *Protein MPNN* com o objetivo de se ligar ao domínio de ligação ao receptor da proteína *spike* do vírus SARS-CoV-2 (representada em *cartoon* vermelho) e neutralizar este vírus, pelos investigadores do projeto BioPlaTTAR [23].



## Referências

- [1] J. C. Kendrew, R. E. Dickerson, B. E. Strandberg, R. G. Hart, D. R. Davies, D. C. Phillips, V. C. Shore, *Nature* **1960**, *185*, 422-427. DOI: 10.1038/185422a0.
- [2] *The PyMOL Molecular Graphics System, Version 2.5.0* Schrödinger, LLC.
- [3] S. E. Phillips, *J. Mol. Biol.* **1980**, *142*, 531-554. DOI: 10.1016/0022-2836(80)90262-4.
- [4] K. D. Gibson, H. A. Scheraga, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **1967**, *58*, 420-427. DOI: 10.1073/pnas.58.2.420.
- [5] M. Levitt, A. Warshel, *Nature* **1975**, *253*, 694-698. DOI: 10.1038/253694a0.
- [6] Y. Duan, P. A. Kollman, *Science* **1998**, *282*, 740-744. DOI: 10.1126/science.282.5389.740.
- [7] D. E. Shaw, P. Maragakis, K. Lindorff-Larsen, S. Piana, R. O. Dror, M. P. Eastwood, J. A. Bank, J. M. Jumper, J. K. Salmon, Y. Shan, W. Wriggers, *Science* **2010**, *330*, 341-346. DOI: 10.1126/science.1187409.
- [8] D. E. Shaw, R. O. Dror, J. K. Salmon, J. P. Grossman, K. M. Mackenzie, J. A. Bank, C. Young, M. M. Deneroff, B. Batson, K. J. Bowers, E. Chow, M. P. Eastwood, D. J. Jerardi, J. L. Klepeis, J. S. Kuskin, R. H. Larson, K. Lindorff-Larsen, P. Maragakis, M. A. Moraes, S. Piana, Y. Shan, B. Towles, *Proc. Int. Conf. High Perform. Comput. Netw. Storage Anal. SC 2009*, **2009**, 65, 1-11. DOI: 10.1145/1654059.1654126.
- [9] W. J. Browne, A. C. North, D. C. Phillips, K. Brew, T. C. Vanaman, R. L. Hill, *J. Mol. Biol.* **1969**, *42*, 65-86. DOI: 10.1016/0022-2836(69)90487-2.
- [10] a) M. J. Sutcliffe, I. Haneef, D. Carney, T. L. Blundell, *Protein Eng. Des. Sel.* **1987**, *1*, 377-384. DOI: 10.1093/protein/1.5.377; b) M. J. Sutcliffe, F. R. F. Hayes, T. L. Blundell, *Protein Eng. Des. Sel.* **1987**, *1*, 385-392. DOI: 10.1093/protein/1.5.385.
- [11] A. Sali, T. L. Blundell, *J. Mol. Biol.* **1993**, *234*, 779-815. DOI: 10.1006/jmbi.1993.1626.
- [12] J. Moulton, J. T. Pedersen, R. Judson, K. Fidelis, *Proteins: Struct., Funct., Genet.* **1995**, *23*, ii-iv. DOI: 10.1002/prot.340230303.
- [13] a) K. F. Han, D. Baker, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **1996**, *93*, 5814-5818. DOI: 10.1073/pnas.93.12.5814; b) K. T. Simons, C. Kooperberg, E. Huang, D. Baker, *J. Mol. Biol.* **1997**, *268*, 209-225. DOI: 10.1006/jmbi.1997.0959; c) C. Bystroff, D. Baker, *J. Mol. Biol.* **1998**, *281*, 565-577. DOI: 10.1006/jmbi.1998.1943; d) K. T. Simons, R. Bonneau, I. Ruczinski, D. Baker, *Proteins: Struct., Funct., Genet.* **1999**, *37*, 171-176. DOI: 10.1002/(sici)1097-0134(1999)37:3+%3C171::aid-prot21%3E3.3.co;2-q.
- [14] a) I. N. Shindyalov, N. A. Kolchanov, C. Sander, *Protein Eng.* **1994**, *7*, 349-358. DOI: 10.1093/protein/7.3.349; b) U. Göbel, C. Sander, R. Schneider, A. Valencia, *Proteins: Struct., Funct., Genet.* **1994**, *18*, 309-317. DOI: 10.1002/prot.340180402.
- [15] A. W. Senior, R. Evans, J. Jumper, J. Kirkpatrick, L. Sifre, T. Green, C. Qin, A. Židek, A. W. R. Nelson, A. Bridgland, H. Penedones, S. Petersen, K. Simonyan, S. Crossan, P. Kohli, D. T. Jones, D. Silver, K. Kavukcuoglu, D. Hassabis, *Nature* **2020**, *577*, 706-710. DOI: 10.1038/s41586-019-1923-7.
- [16] K. Tunyasuvunakool, J. Adler, Z. Wu, T. Green, M. Zielinski, A. Židek, A. Bridgland, A. Cowie, C. Meyer, A. Laydon, S. Velankar, G. J. Kleywegt, A. Bateman, R. Evans, A. Pritzel, M. Figurnov, O. Ronneberger, R. Bates, S. A. A. Kohli, A. Potapenko, A. J. Ballard, B. Romera-Paredes, S. Nikolov, R. Jain, E. Clancy, D. Reiman, S. Petersen, A. W. Senior, K. Kavukcuoglu, E. Birney, P. Kohli, J. Jumper, D. Hassabis, *Nature* **2021**, *596*, 583-589. DOI: 10.1038/s41586-021-03828-1.
- [17] J. Abramson, J. Adler, J. Dunger, R. Evans, T. Green, A. Pritzel, O. Ronneberger, L. Willmore, A. J. Ballard, J. Bambrick, S. W. Bodenstein, D. A. Evans, C.-C. Hung, M. O'Neill, D. Reiman, K. Tunyasuvunakool, Z. Wu, A. Žemgulytė, E. Arvaniti, C. Beattie, O. Bertolli, A. Bridgland, A. Cherepanov, M. Congreve, A. I. Cowen-Rivers, A. Cowie, M. Figurnov, F. B. Fuchs, H. Gladman, R. Jain, Y. A. Khan, C. M. R. Low, K. Perlin, A. Potapenko, P. Savy, S. Singh, A. Stecula, A. Thillaisundaram, C. Tong, S. Yakneen, E. D. Zhong, M. Zielinski, A. Židek, V. Bapst, P. Kohli, M. Jaderberg, D. Hassabis, J. M. Jumper, *Nature* **2024**, *630*, 493-500. DOI: 10.1038/s41586-024-07487-w.
- [18] L. Regan, W. DeGrado, *Science* **1998**, *241*, 976-978. DOI: 10.1126/science.3043666.
- [19] B. I. Dahiyat, S. L. Mayo, *Science* **1997**, *278*, 82-87. DOI: 10.1126/science.278.5335.82.
- [20] B. Kuhlman, G. Dantas, G. C. Ireton, G. Varani, B. L. Stoddard, D. Baker, *Science* **2003**, *302*, 1364-1368. DOI: 10.1126/science.1089427.
- [21] J. L. Watson, D. Juergens, N. R. Bennett, B. L. Trippe, J. Yim, H. E. Eisenach, W. Ahern, A. J. Borst, R. J. Ragotte, L. F. Milles, B. I. M. Wicky, N. Hanikel, S. J. Pellock, A. Courbet, W. Sheffler, J. Wang, P. Venkatesh, I. Sappington, S. V. Torres, A. Lauko, V. De Bortoli, E. Mathieu, S. Ovchinnikov, R. Barzilay, T. S. Jaakkola, F. DiMaio, M. Baek, D. Baker, *Nature* **2023**, *620*, 1089-1100. DOI: 10.1038/s41586-023-06415-8.
- [22] J. Dauparas, I. Anishchenko, N. Bennett, H. Bai, R. J. Ragotte, L. F. Milles, B. I. M. Wicky, A. Courbet, R. J. de Haas, N. Bethel, P. J. Y. Leung, T. F. Huddy, S. Pellock, D. Tischer, F. Chan, B. Koepnick, H. Nguyen, A. Kang, B. Sankaran, A. K. Bera, N. P. King, D. Baker, *Science* **2022**, *378*, 49-56. DOI: 10.1126/science.add2187.
- [23] D. H. Silva et al., *manuscrito em preparação*.

>  
Cláudio M. Soares

ITQB NOVA, Instituto de Tecnologia  
Química e Biológica António Xavier.  
claudio@itqb.unl.pt

>  
Diana Lousa

ITQB NOVA, Instituto de Tecnologia  
Química e Biológica António Xavier.  
dlousa@itqb.unl.pt

## 7.<sup>a</sup> Edição do Encontro Ibero- Americano de Líquidos Iônicos (IMIL 2024)

O IMIL 2024 (7<sup>th</sup> Iberoamerican Meeting on Ionic Liquids) decorreu entre os dias 20 e 22 de novembro de 2024 na Faculdade de Ciências da Universidade de Coimbra. Organizado, em colaboração, pelo Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra e pelo Departamento de Química da Universidade de Aveiro, com o apoio da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), o evento reuniu cerca de 165 investigadores provenientes de Portugal, Espanha, Brasil, Chile, México, Austrália e de outros dez países, consolidando-se como um fórum de excelência para a discussão científica de alto nível entre a crescente comunidade científico-académica dedicada à investigação e aplicação de líquidos iónicos, solventes eutéticos profundos e sistemas iónicos relacionados.

O Encontro contou com um programa científico de elevada qualidade, incluindo três palestras plenárias proferidas por investigadores de renome internacional. Maria Forsyth (*Deakin University*, Austrália) abordou o desenvolvimento de eletrólitos à base de líquidos iónicos para baterias de lítio e sódio, destacando os avanços na interface eletrólito-eléctrodo e o impacto na estabilidade do ciclo de carga. Roland Kalb (*Proionic GmbH*, Áustria) explorou os desafios e inovações na aplicação industrial de líquidos iónicos, desde a síntese em larga escala até à utilização em biotecnologia e armazenamento de energia, com uma visão realista sobre a crescente comercialização de tecnologias que utilizam esta classe de solventes neotéricos. José Palomar (*Universidad Autónoma de Madrid*, Espanha) foi premiado com o *IMIL Scientific Recognition Award*, e a sessão plenária de reconhecimento apresentou uma visão completa das contribuições nesta área científica, com uma sequência completa de resultados sobre a combinação de simulações moleculares e métodos experimentais para estudo dos líquidos iónicos na captura de dióxido de carbono e outros processos de extração.

O programa incluiu ainda seis *keynotes* convidadas, que apresentaram resultados inovadores e permitiram uma ampla discussão sobre tópicos como a aplicação de líquidos iónicos em baterias de estado sólido, polímeros iónicos, extração de biomoléculas e a sustentabilidade dos solventes eutéticos profundos. Além das diversas comunicações a convite, o Encontro contou com a apresentação de outras 16 comunicações orais, bem como 30 comunicações *flash* de 5 minutos, uma estratégia que permitiu aos jovens investigadores partilhar os seus trabalhos mais recentes. A discussão científica do IMIL 2024



Foto de grupo. Créditos: Mariana Brandão Alves (Univ. Coimbra, marianabna33@gmail.com) & Helena Passos (Univ. Porto, hpassos@fe.up.pt).

foi enriquecida pela diversidade e inovação das 110 apresentações em painel que, em conjunto com várias apresentações orais, fomentaram debates intensos e colaborativos no sentido de consolidar a comunidade Ibero-Americana de Líquidos iónicos.

Uma das novidades desta edição foi a Escola de Inverno sobre Líquidos Iónicos, realizada nos dias 18 e 19 de novembro. Esta iniciativa proporcionou uma formação abrangente a jovens cientistas, combinando sessões teóricas e práticas e promovendo oportunidades valiosas de colaboração junto dos vários oradores do curso.

Além de todas as atividades científicas, o evento contou com um programa social bastante dinâmico, o qual incluiu uma sessão de boas-vindas, o jantar do evento com uma apresentação de um Grupo de Fados de Coimbra e visitas culturais ao Paço das Escolas e à Biblioteca Joanina da Universidade de Coimbra, ambos parte do Património Mundial da UNESCO.

No encerramento do evento, os presidentes da Comissão Organizadora Prof. Doutor Jorge Pereira (Universidade de Coimbra) e Prof. Doutor João Coutinho (Universidade de Aveiro), destacaram a energia, alegria e entusiasmo dos participantes, bem como a profícua discussão entre jovens e investigadores experientes provenientes de diversos países, que não só enriqueceram esta edição com a sua participação, mas também, através de uma ampla troca de ideias e experiências, permitiram consolidar e fortalecer a comunidade Ibero-Americana dedicada aos líquidos iónicos e classes afins. Agradeceram igualmente o apoio dos patrocinadores e das instituições envolvidas, com um agradecimento especial à SPQ pelo seu contínuo apoio à realização do evento. Antes de finalizar o evento, foi já anunciada a próxima edição do IMIL, que terá lugar em 2026, na cidade de Salvador, Bahia, Brasil, prometendo continuar a tradição de excelência científica e colaboração de proximidade que caracteriza estes Encontros.

Mais informações e fotos do evento estarão disponíveis nos canais oficiais do IMIL 2024.

&gt;

**Ana M. Ferreira Takahashi**  
ana.conceicao@ua.pt

&gt;

**João A. P. Coutinho**  
jcoutinho@uc.pt

&gt;

**Jorge F. B. Pereira**  
jfbpereira@eq.uc.pt



## VIII Jornadas Ibéricas de Fotoquímica

A 8.ª edição das Jornadas Ibéricas de Fotoquímica (8'JIF) e a 1.ª Conferência Franco-Ibérica de Fotoquímica (1'FICP) decorreram na Academia das Ciências de Lisboa, de 11 a 13 de setembro de 2024. Este evento, organizado pelo Grupo de Fotoquímica da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), pelo Grupo Especializado de Fotoquímica da *Real Sociedad Española de Química* (GRUFO-RSEQ) e pela divisão SP2P (*Photochimie, Photophysique et Photosciences*) da *Société Chimique de France* (SCF), contou com uma adesão internacional considerável.



Fotografia de Grupo.

Pela primeira vez, a comunidade francesa de fotoquímica participou ativamente neste evento, fomentando a colaboração e a troca científica entre Portugal, Espanha e França. A conferência foi composta por três palestras plenárias, 17 palestras convidadas, 31 comunicações orais e 39 apresentações em painel, reunindo um total de 109 participantes. Entre os

momentos de maior destaque, sublinha-se a entrega de prémios aos melhores trabalhos apresentados por jovens investigadores: Saül Garcia Orrit (melhor comunicação em painel) e Eloé Dubus (melhor comunicação oral), com o apoio da *Chemistry Europe*.

O programa científico incluiu avanços recentes em fotoquímica fundamental e aplicada, com tópicos que abrangeram desde sensores fotoquímicos luminescentes até reatividade fotoquímica e fotofísica de materiais. Para além das sessões científicas, a conferência proporcionou várias oportunidades de *networking*, incluindo uma recepção de boas-vindas na Academia das Ciências e um jantar de gala na emblemática Casa do Alentejo, reforçando o espírito de intercâmbio científico num ambiente amigável e inspirador.

O evento contou ainda com uma Escola de Formação em Fotoquímica, realizada no *campus* da NOVA FCT no dia 10 de setembro, que atraiu jovens investigadores interessados em aprofundar os seus conhecimentos na área. A 9.ª edição das Jornadas Ibéricas de Fotoquímica será organizada pelos nossos colegas espanhóis em 2026, dando continuidade a esta tradição científica.

Mais informações podem ser encontradas em: [viiiijf.events.chemistry.pt](http://viiiijf.events.chemistry.pt).

>

**A Comissão Organizadora**

[viiiijf@chemistry.pt](mailto:viiiijf@chemistry.pt)

## Primeira Edição do Curso Internacional “Enabling Technologies for Chemical Synthesis”

A 1.ª edição do curso “*Enabling Technologies for Chemical Synthesis*”, organizado pela Escola de Executivos da NOVA FCT, ocorreu no passado mês de fevereiro, e foi um marco na formação de profissionais da área química, destacando-se como um programa inovador e internacional ([execed.fct.unl.pt/skills\\_building\\_prog/enabling-technologies-in-chemical-synthesis](http://execed.fct.unl.pt/skills_building_prog/enabling-technologies-in-chemical-synthesis)). Este curso pioneiro decorreu com grande sucesso, contando com a participação de 45 inscrites, incluindo 28 alunos – provenientes maioritariamente do mundo académico e de empresas como a Hovione e a Axplore –, além de nove oradores internacionais e o apoio de quatro patrocinadores (AGI, MT Brandão, LaborSpirit e Dias de Sousa), que estiveram representados por oito participantes.

### Um Curso de Excelência e Relevância Global

O curso foi cuidadosamente estruturado para responder às necessidades emergentes da química moderna, capacitando os participantes com competências práticas e teóricas nas mais recentes tecnologias de ponta que estão a transformar a síntese química. Coordenado pela Prof.ª Maria Manuel Marques, da NOVA FCT / LAQV, em colaboração com o Prof. Carlos Afonso da Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, o programa combinou uma abordagem interdisciplinar com conteúdos avançados, focado na introdução de novas tecnologias como elementos-chave para a sustentabilidade e a inovação no desenvolvimento de processos sintéticos.

O curso foi organizado em três módulos principais, e foi lecionado por especialistas internacionais nas diversas áreas:

1. *Sustainable Chemical Technologies*: Química de Fluxo (Prof. Dr. Stefan Bräse – *Karlsruhe Institute of Technology*); Eletroquímica (Prof. Dr. Kevin Lam – *University of Greenwich*); Mecanoquímica (Prof. Dr. Evelina Colacino – *Université de Montpellier*); e *Machine Learning e Inteligência Artificial* (Dr.<sup>a</sup> Alessandra Toniato – *IBM Research Europe – Zurique*).

2. *Enabling Catalytic Technologies*: Fotocatálise (Prof. Dr. Burkhard König – *Regensburg University*); e Biocatálise (Prof. Dr. Jan Deska – *University of Helsinki*).

3. *Chemical Engineering Technologies*: Tecnologia de Membranas (Prof. Andrew Livingston – *Queen Mary University of London*); Fluídos Supercríticos (Prof. Walter Leitner – *Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion*); e Ultra-alta Pressão (Dr.<sup>a</sup> Isabelle Chataigner – *Université de Rouen Normandie*).

### Impacto e Relevância para os Químicos

O curso destacou-se não só pela qualidade dos conteúdos e das sessões formativas, mas também pela sua relevância na abordagem aos desafios contemporâneos da química. O foco na sustentabilidade e na incorporação de tecnologias inovadoras, como *machine learning* e inteligência artificial, demonstrou o compromisso em preparar profissionais para liderar a transição para práticas mais eficientes e sustentáveis, tanto na indústria como na academia.

Os participantes adquiriram competências fundamentais para adaptar metodologias tradicionais à realidade tecnológica atual, desde a análise de processos químicos até à implementação de abordagens integradas que combinam diferentes tecnologias.

### Apoio Institucional e Patrocinadores

O sucesso do curso contou com o suporte de patrocinadores de renome, como AGI, MT Brandão, LaborSpirit e Dias de Sousa, reforçando a ligação entre os setores académico e industrial. A presença de oradores internacionais de prestígio elevou ainda mais o nível do programa, promovendo a troca de conhecimentos e o *networking* entre especialistas de diferentes áreas.

### Próximos Passos

O sucesso desta iniciativa reforça o compromisso da NOVA FCT / LAQV em continuar a desenvolver programas de excelência que capacitem os profissionais a enfrentar os desafios futuros e a explorar as oportunidades que surgem com o avanço tecnológico.

Em abril de 2025 terá lugar a segunda edição lecionada por especialistas da indústria química e farmacêutica ([exceed.fct.unl.pt/skills\\_building\\_prog/enabling-technologies-in-pharmaceutical-and-chemical-development](https://exceed.fct.unl.pt/skills_building_prog/enabling-technologies-in-pharmaceutical-and-chemical-development)).

>

**Maria Manuel Marques**

[msbm@fct.unl.pt](mailto:msbm@fct.unl.pt)

## 16 Anos de Conquista e Inovação: O GQJ Celebra o Seu Legado

No passado dia 8 de dezembro, o Grupo de Químicos Jovens (GQJ) celebrou com entusiasmo os seus 16 anos de existência. Fundado em 2007, o GQJ nasceu com a missão de promover a interação científica e dinamizar a comunidade de jovens químicos em Portugal, tanto os que se dedicam à investigação como os que atuam na indústria. Desde a sua fundação, o grupo tem-se destacado por representar os jovens químicos portugueses em importantes plataformas internacionais, como a *European Young Chemists Network* (EYCN) e a *International Younger Chemists Network* (IYCN).

Ao longo destes 16 anos, o GQJ contou com a colaboração de cerca de 35 membros da direção, que foram fundamentais na implementação de uma vasta gama de projetos e iniciativas. Entre os mais notáveis,

destacam-se as oito edições do congresso bienal PYChem, as 14 edições do concurso de vídeo ChemRus, as sete edições do PYCA (Prémio Jovem Químico Português), as quatro edições do FlashChem “Um Flash sobre a Química”, além de inúmeros quilómetros percorridos de norte a sul de Portugal, promovendo a Química e aproximando-a dos mais jovens.

Muitos rostos e mãos dedicadas contribuíram ao longo dos anos para a construção deste legado, representando os interesses e as ambições de todos os jovens químicos do país. A atual direção do GQJ sente-se profundamente grata a todos que fizeram parte dessa trajetória e está comprometida em continuar a trabalhar arduamente pela promoção da Química, pela literacia dos jovens químicos e pela formação de um futuro mais inovador e colaborativo para a nossa comunidade científica.

Desejamos muitos mais anos de sucesso, crescimento e conquistas para o GQJ, sempre com o objetivo de contribuir para a valorização da Química e a representação dos jovens químicos portugueses, tanto no país como no cenário internacional.

# 16 ANOS DE GQJ

"Uma experiência transformadora, onde cada desafio se tornou uma oportunidade de crescer e criar memórias inesquecíveis."

*"yearbook"*

"De desconhecidos a amigos"

*eigen*

Antigos membros de direção, Carina, Joana e Rute!

17ª Assembleia de Delegados  
Setembro 2022, Lisboa

14ª Assembleia de Delegados  
Março 2019, Bremen

3º PYChem  
Maio 2012, Porto

6º PYChem  
Maio 2018, Setúbal

8º PYChem  
Maio 2023, Vila Real

*Pychem*

"Pertencer ao Grupo de Químicos Jovens significa compreender e abraçar a importância de ter um pilar do dinamismo na divulgação da Química no nosso País, a todos os níveis!"

Alunos em Química, Precisam-se!

Química nas Escolas

EYCN: European Young Chemists Network

"The Delegate Assembly brought together a community passionate about Chemistry, eager to shape the future of this science, giving a voice to the younger generations."

19ª Assembleia de Delegados  
Janeiro 2024, Londres

O nosso delegado, João!

A nossa delegada, Carina!

Antigos membros da direção, Ana Rita e João!

13ª Assembleia de Delegados  
Maio 2018, Turim

Buddy Ratner  
Orador plenário

Jantar de conferência  
Antiga Direção do GQJ e presidente da SPQ, com alguns dos oradores plenários

5th Pychem

Abril 2016, Guimarães

> Grupo de Químicos Jovens da SPQ  
ggj@spq.pt

## FlashChem 2024: “A Química Oculta da Vida Quotidiana”

O FlashChem, concurso de fotografia intitulado “Um Flash sobre a Química”, é organizado pelo Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e está aberto a jovens entre os 18 e os 35 anos (inclusive) na área científica da Química e áreas afins. A 4.ª edição do concurso, com o tema “A Química Oculta da Vida Quotidiana”, teve como objetivo destacar a presença da química no nosso quotidiano. Com mais de uma dezena de fotografias a concurso, o júri - composto pela direção do GQJ, o fotógrafo Paulo

Ribeiro e o diretor do Química, Paulo Mendes - teve a difícil tarefa de escolher a fotografia vencedora. A fotografia premiada foi a de Ana Luísa Silva, da Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto, intitulada “A Química do Mundo Físico”, tendo recebido como prémio o acesso ao *workshop* de fotografia “LIGHTROOM MASTERCLASS”, conduzido pelo fotógrafo Paulo Ribeiro (paulsrib.work/workshop). A foto tem direito a destaque nesta edição do Química. Foi ainda atribuída uma menção honrosa a Isabela Santos, também da Faculdade de Farmácia da Universidade do Porto, pela fotografia “A Poética do Girassol e da Natureza”.

&gt;

**Grupo de Químicos Jovens da SPQ**

ggj@spq.pt

## O ChemRus e o “Química nas Escolas” Estão de Volta!



O Grupo de Químicos Jovens (GQJ) está a organizar a 14.ª edição do seu tradicional concurso de divulgação científica em vídeo, o ChemRus 2025. Destinado a alunos do ensino secundário, o concurso deste ano tem como tema “A Química Secreta da Natureza” e promete entusiasmar todos os amantes da Química e da Natureza! O concurso decorrerá de 6 de janeiro a 28 de março de 2025. Para mais informações, visite o site do GQJ (jovens.spq.pt/chemrus2025).

O projeto “Química nas Escolas” também está de volta à estrada com o início do novo letivo! Este

projeto tem como objetivo principal aproximar os mais jovens desta fascinante e versátil área que é a Química, demonstrando as vastas oportunidades profissionais e aplicações desta ciência na sociedade. Durante o corrente ano letivo, o projeto promete envolver centenas de alunos e contará com o apoio da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), da Porto Editora e da *Chemistry Europe*.

&gt;

**Grupo de Químicos Jovens da SPQ**

ggj@spq.pt

## Prémio Luso-Francês 2024 Atribuído à Professora Filipa Ribeiro

Filipa Ribeiro, Professora Catedrática do Instituto Superior Técnico - Universidade de Lisboa, foi galardoada com o Prémio Luso-Francês de 2024 (*Portugal-France Chemistry Bilateral Lectureship Award*), concedido pela Sociedade Francesa de Química - instituído pela SPQ e pela Sociedade Francesa de Química, pelo seu notável trabalho e pelos fortes laços estabelecidos com os químicos franceses. A Professora Filipa Ribeiro sucede aos Professores Armando Pombeiro (UL, 2018), João Rocha (UA, 2020) e José Nuno Lopes (UL, 2022).

As suas principais áreas de investigação centram-se na catálise heterogénea, especialmente na utilização de catalisadores à base de zeólitos para a transformação de diferentes hidrocarbonetos para processos de refinação de petróleo ou para a valorização e coprocessamento de biomassa.

O prémio será entregue na primavera de 2025, em Paris.

A lista completa de premiados está disponível em: [spq.pt/premios/luso-frances/lista](http://spq.pt/premios/luso-frances/lista).

&gt;

**Bruno Machado**

brunofm.feup@gmail.com



## Prémio EuChemS Lecture 2023 Atribuído a Katherine Gomez

O Prémio *EuChemS Lecture* 2023 foi concedido a Katherine Villa Gomez. Todos os anos são premiados os principais resultados atingidos por um investigador júnior que trabalha no campo da Química num país com uma organização pertencente à EuChemS.

Katherine é líder de um grupo de investigação no *Institut Català d'Investigació Química* (ICIQ). Os seus principais interesses na investigação incluem a fotocatalise, os nanomateriais, as energias renováveis, os micro/nanomotores e a remediação ambiental. O Prémio *EuChemS Lecture* reconhece as suas contribuições notáveis nos domínios dos combustíveis solares, da energia e dos micromotores autopropulsionados. Katherine receberá o seu prémio e dará uma palestra no 10.º Congresso de Química EuChemS (ECC10) que decorrerá em Antuérpia (Bélgica) em 2026.



Mais informações acerca deste prémio disponíveis em: [euchems.eu/awards/lecture-award](http://euchems.eu/awards/lecture-award).

>

**Bruno Machado**

[brunofm.feup@gmail.com](mailto:brunofm.feup@gmail.com)

## Prémio Hanwha–TotalEnergies IUPAC Young Polymer Scientist de 2024 Atribuído a Lutz Nuhn e Rongrong Hu

O Prémio *Hanwha–TotalEnergies IUPAC Young Scientist* (anteriormente Prémio *Samsung–Total Petrochemicals – IUPAC Young Polymer Scientist*) é dedicado a jovens cientistas (com idade não superior a 40 anos) e é patrocinado por uma bolsa da empresa acima mencionada. O prémio foi atribuído pela primeira vez no congresso MACRO 2004 (Paris) e é concedido bianualmente durante o Congresso Mundial de Polímeros da IUPAC. Os galardoados são selecionados de entre os nomeados por um Comité da Divisão de Polímeros da IUPAC. O prémio de 2024 foi entregue no Macro2024 em Warwick, Reino Unido, a dois premiados (*ex aequo*), os Professores Lutz Nuhn e Rongrong Hu.

O Professor Dr. Lutz Nuhn (*Julius-Maximilians-Universität Würzburg*, Alemanha) foi distinguido com este prémio pela sua investigação em estratégias sintéticas inovadoras para nanotransportadores poliméricos multiresponsivos e biodegradáveis, e suas aplicações biomédicas versáteis, particularmente no domínio das imunoterapias avançadas.

A Professora Rongrong Hu (*South China University of Technology*, China) foi distinguida com este prémio pelo seu trabalho em novas reações de polimerização,

exploração de estruturas poliméricas inovadoras e desenvolvimento de materiais poliméricos avançados. O seu grupo de investigação foi pioneiro em mais de 30 tipos de polimerizações multicomponentes.

A lista de galardoados anteriores inclui Qian Chen e Eric Appel (2022), Athina Anastasaki e Changle Chen (2020), Andreas Walther (2018), e Moon Jeong Park e Brent Sumerlin (2016).



>

**Bruno Machado**

[brunofm.feup@gmail.com](mailto:brunofm.feup@gmail.com)



**Foto vencedora do concurso FlashChem 2024,  
promovido pelo grupo de Químicos Jovens.**

**“A química do mundo físico”, Ana Luísa Silva**

*“À nossa volta, milhares de reações químicas, tão fascinantes quanto comuns, passam despercebidas, escondidas na trivialidade do quotidiano. Aquela que à primeira vista é uma simples imagem de ferrugem, esconde um dos mais comuns processos químicos: a oxidação. O metal, que com o tempo foi exposto a água e oxigénio presentes no ar, sofreu transformações estruturais, dando origem à ferrugem. Um lembrete que a química molda o mundo físico, mesmo quando se esconde no tempo.”*

# Júlio Máximo de Oliveira Pimentel (1809–1884), 2.º Visconde de Vila Maior



**Júlio Máximo de Oliveira Pimentel, in *Revista Contemporanea de Portugal e Brazil*, vol. II, n.º 10 (1860).**

Júlio Máximo de Oliveira Pimentel nasceu em Torre de Moncorvo, em 5/10/1809, no seio de uma família de tradições liberais. Matriculou-se na Universidade de Coimbra em 1826, inscrevendo-se nas Faculdades de Matemática e de Filosofia, mas interrompeu os estudos em 1828, após a usurpação miguelista. Em 1832, alistou-se no exército liberal, tendo combatido na Serra do Pilar durante o cerco do Porto, integrado no Batalhão de Voluntários Académicos. Desta campanha saiu com o posto de Alferes, uma condecoração (Cavaleiro da Ordem da Torre e Espada, do Valor, Lealdade e Mérito) e um ferimento numa perna, que lhe deixou sequelas para toda a vida. Terminada a guerra civil, voltou a Coimbra para concluir os seus estudos, frequentando sempre as duas Faculdades; mas só fez o exame de matemática, em 16/6/1837.

Entretanto, foi convidado a concorrer ao lugar de Professor da 6.ª cadeira (Química Geral e Noções das suas Principais Aplicações às Artes) da recém-criada Escola Politécnica de Lisboa. Aceitou a contragosto, pois não se considerava suficientemente preparado nesta disciplina; mas obteve a promessa de poder, mais tarde, realizar um estágio em Paris para adquirir conhecimentos práticos. Júlio Pimentel abriu o Curso de Química em março de 1838, no final do ano foi aprovado em concurso de provas públicas e, dois anos depois, passou a Lente proprietário da 6.ª cadeira, a título definitivo.

Foi só em setembro de 1844 que se concretizou o prometido estágio. Em Paris, foi admitido como ajudante de preparador no laboratório de Eugène Péligot, no *Conservatoire des Arts et Métiers*. Foi aqui que Júlio Pimentel adquiriu competências para os trabalhos laboratoriais e para as mais variadas análises químicas. Além de preparar as demonstrações que

Péligot apresentava nas suas aulas, assistia também às aulas de outros químicos conceituados (Dumas, Chevreul, Orfila, Gay-Lussac). Fez ainda uma longa viagem de estudo por vários países europeus, visitando fábricas e universidades.

Regressou a Portugal na primavera de 1846, quando o país mergulhava de novo na guerra civil. A Escola Politécnica estava encerrada, e as aulas só recomeçaram em 1848. Entretanto, Júlio Pimentel tinha sido convidado para consultor técnico da fábrica do sabão (que nesta altura era monopólio do Estado) e depois também da fábrica de produtos químicos da Verdelha (propriedade do Conde do Farrobo); estas colaborações industriais foram a sua principal ocupação neste período, juntamente com os trabalhos de investigação que realizava no laboratório da Casa da Moeda (o edifício da Politécnica, destruído por um incêndio em 1844, ainda não fora reconstruído).

Foi no Grémio Literário, em março de 1849, que Júlio Pimentel fez a sua estreia pública como cientista, apresentando uma série de palestras sobre química aplicada à agricultura, a que se seguiu o estudo comparativo do sabão português e estrangeiro. No verão desse mesmo ano, fez a análise das águas minerais das Caldas da Rainha, e redigiu uma “Memória” que enviou à Academia das Ciências, sendo eleito sócio correspondente. Nos anos seguintes publicaria também as análises das águas de Moura, do Gerês, e de S. João do Deserto, em Aljustrel.

Em 1850, iniciou-se a publicação, em fascículos, das *Lições de Chymica Geral e suas Principaes Aplicações*, uma obra inovadora que incluía uma série de estampas com as montagens experimentais correspondentes a 112 trabalhos práticos, desenhadas pelo autor. Com este livro, Júlio Pimentel contribuiu de forma decisiva para a modernização do ensino da Química, e reforçou o prestígio do seu curso na Escola Politécnica. Em 1854, assumiria também a docência da 7.ª cadeira, Química Aplicada às Artes, do Instituto Industrial de Lisboa, cargo que assegurou até 1858, altura em que pediu a exoneração para passar a dirigir o Instituto Agrícola e Escola Regional de Lisboa. Em 1859, foi criada na Escola Politécnica uma nova cadeira, Química Orgânica e Análise Química, da qual Júlio Pimentel passou a ser o Lente proprietário, por troca com a 6.ª Cadeira, que passou a focar a Química Inorgânica. As suas funções docentes terminaram em 1864, data em que se jubilou.

Além das consultorias técnicas nas fábricas do sabão (1846-1851) e da Verdelha (1847-1857), Júlio Pimentel esteve também envolvido numa outra iniciativa industrial, a fábrica de produtos químicos da Póvoa (de Santa Iria), da Sociedade Geral de Produtos Químicos. Em 1857, fez o plano e orçamento, e foi incumbido de contratar a aquisição, em França, de equipamentos e

pessoal especializado; depois, dirigiu a fábrica durante a primeira fase da sua existência (1859-1862).

Com a Regeneração, Júlio Pimentel vai assumir alguns cargos públicos de relevo: em 1852, foi eleito vereador da Câmara Municipal de Lisboa (CML) e deputado às Cortes, e foi nomeado vogal do Conselho Geral de Comércio e Indústria; em 1857, quando se declarou a epidemia de febre amarela em Lisboa, foi nomeado vogal do Conselho Extraordinário de Saúde Pública; no ano seguinte, foi eleito para um segundo mandato na CML, desta vez como presidente; em 1861, recebeu o título de Visconde; e no ano seguinte, passou a ter assento na Câmara dos Pares do Reino.

Foram inúmeras as comissões em que participou, assim como os pareceres e relatórios que redigiu no desempenho destas funções; mas importa, sobretudo, destacar a sua missão no âmbito da Exposição Universal de Paris, em 1855: Comissário encarregue de organizar a mostra dos produtos portugueses, vogal da Comissão Técnica e membro do Júri internacional. Esta foi uma missão de cerca de oito meses, que Júlio Pimentel desempenhou de forma competente, sendo agraciado por D. Pedro V com o grau de Comendador da Ordem de Nossa Senhora da Conceição de Vila Viçosa. Mais tarde, seria nomeado Comissário Régio para as Exposições de Londres (1862) e de Paris (1878), e membro do júri na Exposição de 1867, em Paris.

Entre 1849 e 1864, Júlio Pimentel publicou mais de uma centena de trabalhos, não só de investigação, mas também de divulgação científica, tarefa à qual dedicou particular atenção. Em 1853, publicou um artigo na *Revista Universal Lisbonense* em que descreve detalhadamente o fabrico da soda na Fábrica da Verdelha; o que hoje sabemos sobre esta unidade industrial, que foi a primeira fábrica de produtos químicos de base no país, deve-se sobretudo a este artigo. Em 1855, aproveitando a estadia em Paris, completou os seus estudos sobre os ácidos gordos extraídos das sementes do brindeão e da mafurra, que depois publicou em colaboração com Jules Bouis (que conhecera no Laboratório de Péligot, durante o seu estágio). A partir de 1857, após a epidemia de febre amarela que assolou a capital, vai dedicar especial atenção à higiene pública, publicando uma série de artigos nos *Annaes das Sciencias e Lettras*.

No que se refere a divulgação científica, destacam-se as “Palestras científicas”, publicadas na *Revista Contemporanea de Portugal e Brazil* (1859-1861), a “Revista dos trabalhos chimicos”, nos *Annaes das Sciencias e Lettras* (1857-1858) e os artigos sobre produtos industriais, publicados no *Archivo Universal* (1859-1860).

Quando terminaram as suas colaborações com a indústria, Júlio Pimentel resolveu fixar-se com a família em Moncorvo, orientando os seus interesses de inves-



tigação para o estudo da vinha e da vitivinicultura. No início de 1864, jubilou-se da Politécnica, reformou-se do Exército com a patente de Tenente-coronel e obteve uma comissão do Ministério das Obras Públicas para estudar a ampelografia do país vinhateiro do Douro. Os seus “Preliminares da ampelographia e oenologia do paiz vinhateiro do Douro” constituem uma obra pioneira, em que descreve detalhadamente as vinhas, as castas, os métodos de vindima e de vinificação, os custos de produção, as produções de vinho e os preços praticados, assim como as condições meteorológicas e a análise dos solos em cada uma das principais quintas do Douro, desde Barca d’Alva até ao Pinhão. Em 1866, foi incumbido de um novo estudo, sobre os processos de vinificação usados nos principais centros vinhateiros do continente do reino, juntamente com João Inácio Ferreira Lapa e António Augusto de Aguiar. Em 1868, publicou o “Tratado de vinificação para vinhos genuínos”, uma das suas obras mais relevantes nesta área, cuja segunda edição (de 1883) foi depois traduzida para inglês com o título “The Viniculture of Claret”, tendo sido amplamente divulgada na Califórnia. Publicou ainda cerca de 40 artigos no *Jornal de Horticultura Practica* e no *Archivo Rural*, além de outros livros e relatórios. Os seus trabalhos sobre a vinha e o vinho foram reconhecidos pela *Société des Agriculteurs de France* com a atribuição de uma medalha de ouro durante a Exposição Universal de 1878.

Em 1869, Júlio Pimentel foi nomeado Reitor da Universidade de Coimbra, cargo que ocupou até falecer, em 1884. A sua obra mais emblemática foi a criação da Escola Ampelográfica no Jardim Botânico da Universidade. Coordenou também as celebrações do Centenário da Reforma Pombalina, em 1872, e a participação da Universidade na Exposição Universal de Paris, em 1878. Neste evento, foi agraciado pelo governo francês com o grau de Comendador da Legião de Honra e com o grau de Oficial da Instrução Pública. Em 1883, foi ainda incumbido de estudar a reforma do ensino superior; o relatório deste estudo foi publicado postumamente n’ *O Instituto*, revista da Universidade de Coimbra.

Júlio Pimentel foi um químico notável no seu tempo, com uma vasta obra focada nas aplicações práticas da ciência à agricultura, à indústria, e ao bem-estar da população. Ao longo da sua vida, procurou sempre que o seu trabalho fosse útil ao País e aos seus concidadãos. Na Escola Politécnica, foi responsável pela introdução do ensino prático da química; mas o seu nome fica também associado aos alvares da indústria química no país. Foi ainda um pioneiro da ampelografia e da enologia em Portugal, sendo o seu trabalho reconhecido além-fronteiras.

### Obras (seleção):

“Considerações relativas à composição e analyse do

sabão, seguidas dos resultados das analyses comparativas do sabão portuguez e estrangeiro. Lidas no Gremio Litterario, na noite de 23 de Abril”. *Revista Universal Lisbonense*, 2.ª série, Tomo I, n.º 25, 26/4/1849, 289-291.

“Analyse das águas mineraes das Caldas da Rainha, feita em Julho de 1849, precedida de uma introdução historica”, *Memorias da Academia Real das Sciencias*. Lisboa: Tipographia da Academia das Sciencias. 2.ª série, Tomo II, Parte II, 1850.

*Lições de chymica geral, e suas principaes applicações*. 3 vols. Lisboa: J. P. Lavado, 1850-1852.

“Fabrico da Soda em Portugal”, *Revista Universal Lisbonense*, 2.ª série, Tomo V: n.º 29 (27/1/1853); n.º 30 (3/2/1853); n.º 38 (31/3/1853).

Com Jules Bouis, “Nouvelle production de l’acide palmitique par le suif de mafurra”, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences*. Paris, Tomo 41, 1855.

Com Jules Bouis, “Composition de la stéarine végétale extracté des grames du brindonnier (*Brindonia indica*)”, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences*. Paris, Tomo 44, 1857.

Com Joaquim António da Silva, “Estudos sobre a viciação do ar atmosphérico”, *Annaes das Sciencias e Lettras, 1ª Classe*. Tomo I, maio de 1857, p. 119-138. Lisboa: Academia Real das Sciencias.

“Nota sobre a facultade fertilizante das dejeccções animaes tornadas inodoras pelos meios chimicos”, *Annaes das Sciencias e Lettras, 1ª Classe*. Tomo I, junho de 1857, p. 197-203. Lisboa: Academia Real das Sciencias.

*Relatório sobre a Exposição Universal de Paris: artes chimicas*. Lisboa: Imprensa Nacional. Parte I, 1857; Parte II, 1859.

“Descripção do processo para a fabricação do papel de agave americana”, *O Instituto: jornal scientifico e litterario* (Coimbra) 1860, 8, 43-44.

“O canamo na Villariça”, *Archivo Rural* 1863, 6, 567-572.

“A sericultura no districto de Bragança, principalmente no concelho de Moncorvo”, *Archivo Rural* 1865, 7, 341-352.

*Preliminares da ampelographia e oenologia do paiz vinhateiro do Douro*. 4 fascículos. Lisboa: Imprensa Nacional, 1865-1869.

Com João Inácio Ferreira Lapa e António Augusto de Aguiar, *Memoria sobre os processos de vinificação empregados nos principaes centros vinhateiros do continente do reino*, 2 volumes. Lisboa: Imprensa Nacional, 1867-1868.

*Tratado de vinificação para vinhos genuínos*, 2 vols. Lisboa: Typographia da Academia Real das Sciencias, 1868-1869.

*Ampelographia e oenologia do paiz vinhateiro do Douro*. Lisboa: Imprensa Nacional, 1870.

*Manual de viticultura practica*. Coimbra: Imprensa da Universidade, 1875.

*O Douro ilustrado: album do Rio Douro e paiz vinhateiro: introdução historica e descriptiva.* Porto: Magalhães & Moniz, 1876.

*Exposição succinta da organização actual da Universidade de Coimbra precedida de uma breve noticia historica d' este estabelecimento.* Coimbra: Imprensa da Universidade, 1877.

"Notícia da Eschola Ampelographica do Jardim Botânico da Universidade de Coimbra", *O Instituto: jornal científico e litterario* (Coimbra) 1878-1879, 26, 17-28.

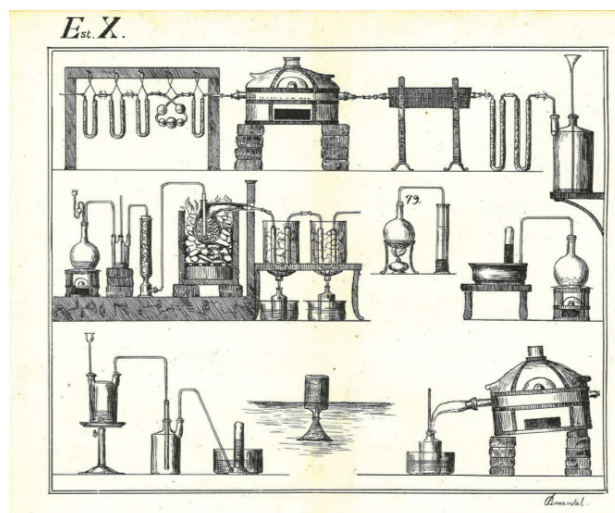
*The viniculture of claret: a treatise on the making, maturing, and keeping of claret wines.* (Trad. J. I. Bleasdale). San Francisco: Payot, Upham and Co. Publishers, 1884.

*Memorial biographico de um militar illustre, o General Claudino Pimentel*, Prólogo de Latino Coelho. Lisboa: Imprensa Nacional, 1884.

*Memórias: Visconde de Vila Maior.* Prefácio e transcrição de Adília Fernandes. Introdução de Manuel Pimentel Quartim Bastos. Coimbra: Palimage, 2014.



Retrato do Visconde de Vila Maior [Cortesia da Universidade de Coimbra].



Estampa X, "Lições de Chymica Geral e suas Principaes Aplicações", Tomo I, 1850 [Cortesia de Marília Peres e Maria do Carmo Elvas].

## Bibliografia

- A. S. Tullio, "Chronica", *A Epoca: jornal de industria, ciencias, litteratura e bellas-artes* **1849**, 39, 189.
- J. M. Latino Coelho, "Júlio Máximo de Oliveira Pimentel", *Revista Contemporanea de Portugal e Brazil*, II, **1860**, 439-455 e 559-570; III, **1861**, 11-17.
- A. Candido, "Visconde de Villa-Maior", *Anuario da Universidade de Coimbra, Anno Lectivo de 1884 a 1885*. Coimbra: Imprensa da Universidade, 1884.
- A. A. F. Pinto, "Visconde de Villa-Maior", *O Instituto: jornal científico e litterario* (Coimbra) **1885**, 32, 217-218.
- J. A. Henriques, "Visconde de Vila Maior", *Jornal de Horticultura Prática* **1885**, 16, 7-14.
- G. Mota, "O Visconde de Vila Maior: alguns apontamentos sobre a sua vida e ação". *Biblos*, X, **2012**, 245-292.
- I. M. N. Cruz, *Da Prática de Química à Química Prática - Desenvolvimento da Prática de Química no Ensino Português (1852-1889)*. Tese de Doutoramento em História e Filosofia da Ciência, Universidade de Évora, **2016**.
- G. Mota, "A herança do 2.º Visconde de Vila Maior", *Boletim do Arquivo da Universidade de Coimbra*, XXXIII, **2020**, 69-93.
- G. Mota, "A livreria de Júlio Máximo de Oliveira Pimentel (1809-1884), 2.º Visconde de Vila Maior", *Boletim do Arquivo da Universidade de Coimbra*, XXXIV, **2021**, 91-245.
- G. Mota, O Visconde de Vila Maior e a Exposição Universal de Paris de 1855, Coimbra, **2022**.
- J. L. Figueiredo, A Relevância da Indústria Química e o seu Contributo para a Sociedade. Cascais: Príncipe Editora, Lda., **2022**.
- I. M. Peres, S. P. Rodrigues, M. C. Elvas, "Júlio Máximo de Oliveira Pimentel e o início do Ensino da Química na Escola Politécnica de Lisboa - Um estudo de Cultura Material", *História da Ciência e Ensino* **2023**, 27, 231-248.
- A. M. Dias da Silva, M. T. Gonçalves, O Douro vinhateiro para além das margens. A Escola Ampelográfica do Jardim Botânico da Universidade de Coimbra (1870-1882), in "Paisagens Culturais da Vinha: Identidades, Desafios e Oportunidades. XX Aniversário da Classificação do Alto Douro Vinhateiro como Património Mundial" (Coord.: Gaspar Martins Pereira, Maria Otília Pereira Lage, Carla Sequeira), **2023**, 23-46. Porto: CITCEM - Centro de Investigação Transdisciplinar Cultura, Espaço e Memória.
- J. L. Figueiredo, Elogio Histórico do Académico Júlio Máximo de Oliveira Pimentel (1809-1884), Visconde de Vila Maior, apresentado na sessão da Academia das Ciências de Lisboa em 4/6/2024.

>

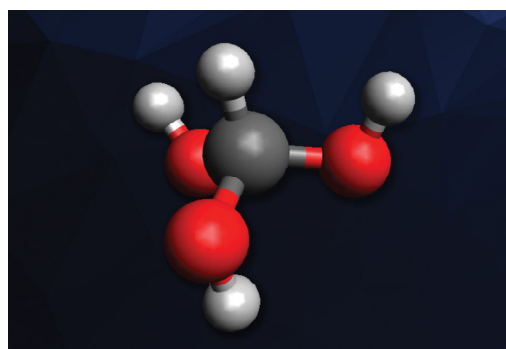
**José Luís Figueiredo**

jlf@fe.up.pt

## Primeira Síntese de Metanotriol – Um Composto Fugaz

Os ácidos ortocarboxílicos (moléculas orgânicas que apresentam três grupos hidroxilo no mesmo átomo de carbono) foram reconhecidos, pelas comunidades de ciência atmosférica e química física orgânica, como intermediários reativos fundamentais no ciclo do aerossol atmosférico. A possibilidade de terem tempos de vida curtos e a sua tendência para desidratar significa que constituem uma das classes mais fugazes de intermediários orgânicos reativos. Efetivamente, os compostos orgânicos com mais de um grupo hidroxilo ligado ao mesmo átomo de carbono não são, geralmente, estáveis e têm tendência a sofrer reações de desidratação. Assim, dióis geminais, ácidos ortocarboxílicos ou metanotetrol, que possuem dois, três ou quatro grupos hidroxilo no mesmo átomo de carbono, respetivamente, constituem alvos sintéticos desafiadores. Dos compostos mais simples deste tipo – isto é, metanodiol, metanotriol e metanotetrol – até agora apenas foi detetado o metanodiol em fase gasosa. Ainda assim, o metanotriol e os seus isómeros podem desempenhar um papel relevante na combustão, em química atmosférica e em astroquímica.

T. Yang (*East China Normal University, Xangai, e Shanxi University, China*), A. M. Mebel (*Universidade Internacional da Florida, Miami, EUA*), R. I. Kaiser (*Universidade do Havai, Manoa, Honolulu, EUA*) e colegas realizaram a primeira síntese de metanotriol usando gelos mistos de metanol e oxigénio molecular, a baixa temperatura, submetidos a irradiação energética. A equipa de investigação expôs gelos de  $\text{CH}_3\text{OH}/\text{O}_2$  a 5 K a elétrons energéticos, com o objetivo de mimetizar os raios cósmicos galácticos energéticos. Os produtos resultantes foram identificados após sublimação usando fotoionização ultravioleta a vácuo (VUV, do inglês *vacuum ultraviolet*) acoplada a *reflector time-of-flight mass spectrometry* (Re-ToF-MS)



Crédito: ChemistryViews

com o apoio de previsões computacionais de vias de fotoionização dissociativas.

Os investigadores apuraram evidências da formação de metanotriol, bem como dos seus isómeros hidroxiperoximetano e hidroxiperoximetanol, e sugeriram que a deteção do metanotriol, como o ácido ortocarbónico mais simples ( $\text{RC}(\text{OH})_3$ ), poderia permitir estudos da sua química e dos seus derivados. Estes resultados podem ser relevantes para a investigação em química atmosférica.

### Fontes

First Synthesis of Elusive Methanetriol, [chemistryviews.org/first-synthesis-of-elusive-methanetriol/](https://chemistryviews.org/first-synthesis-of-elusive-methanetriol/) (acedido em 21/04/2024).

J. H. Marks, X. Bai, A. A. Nikolayev, Q. Gong, C. Zhu, N. F. Kleimeier, A. M. Turner, S. K. Singh, J. Wang, J. Yang, Y. Pan, T. Yang, A. M. Mebel, R. I. Kaiser, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *87*, 606–612. DOI: 10.1021/jacs.4c02637.

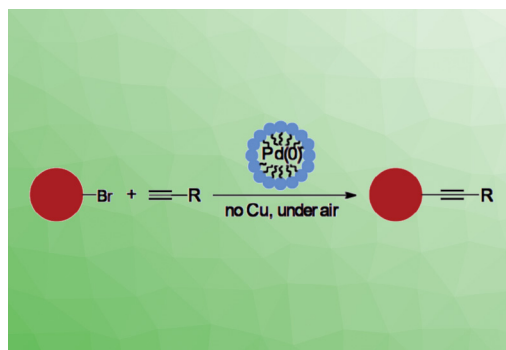
>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

## Acoplamento de Sonogashira em Água e Atmosfera Ambiente

As reações de acoplamento cruzado catalisadas por metais desempenham um papel fundamental em química orgânica permitindo a formação de ligações carbono-carbono. Entre estas reações destaca-se o acoplamento de Sonogashira, fundamental para a síntese de alcinos substituídos e/ou conjugados ( $\text{C}(sp)-\text{C}(sp^2)$ ). Este acoplamento envolve uma reação seletiva entre alcinos terminais e haletos arílicos ou vinílicos, com rendimentos elevados e boa tolerância a diversos grupos



Crédito: ChemistryViews

funcionais. Geralmente, requer o uso de uma atmosfera inerte para proteção do catalisador de paládio e neces-

sita de um co-catalisador à base de cobre. O interesse nos acoplamentos de Sonogashira tem aumentado de forma sustentada devido à relevância da ligação tripla para diversas aplicações, nomeadamente na síntese total de compostos orgânicos e como precursor para moléculas biologicamente ativas.

Sara Mattiello (Universidade de Milano-Bicocca, Milão, Itália) e colegas desenvolveram um método sem cobre para realizar reações de acoplamento de Sonogashira em água e sob atmosfera ambiente (esquema geral na imagem). Estes investigadores aproveitaram a capacidade do surfactante industrial Kolliphor EL para formar micelas livres de oxigénio em meio aquoso. Nestas condições, as reações podem ocorrer mesmo à temperatura ambiente.

A equipa de investigação demonstrou a universalidade desta abordagem sintética preparando vários (hetero)aril alcinos com rendimentos bons a excelentes, incluindo

do exemplos de materiais orgânicos luminescentes. Esta abordagem constitui uma metodologia sustentável, com factores ambientais melhorados (proporção da massa de resíduos por massa de produto) em comparação com protocolos padrão que utilizam solventes orgânicos.

### Fontes

Sonogashira Coupling in Water and Under Air, [chemistryviews.org/sonogashira-coupling-in-water-and-under-air](https://chemistryviews.org/sonogashira-coupling-in-water-and-under-air) (acedido em 24/04/2024).

E. Ghiglietti, E. A. Incarbone, S. Mattiello, L. Beverina, *Eur. J. Org. Chem.* **2024**, e202400223. DOI: 10.1002/ejoc.202400223.

>

Ana Paula Esteves

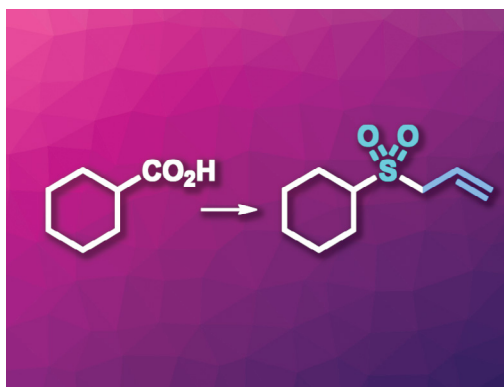
aesteves@quimica.uminho.pt

## Sulfonilação Descarboxilativa de Ácidos Carboxílicos

Os ácidos carboxílicos são uma classe de compostos químicos, de particular importância, que englobam desde ácidos aromáticos simples e ácidos alcanóicos, produzidos comercialmente, a biomoléculas (ácidos gordos e péptidos) e resíduos de valor acrescentado (como lignina e ácidos nafténicos). Os ácidos carboxílicos são precursores úteis em síntese orgânica, nomeadamente na formação de ligações carbono-carbono e carbono-heteroátomo. Para esta última, a utilização de catalisadores baseados em metais abundantes na Terra (por exemplo, ferro) e/ou fotoquímica podem constituir abordagens sintéticas sustentáveis.

R. Zeng (Universidade de Xi'an Jiaotong, China) e colegas desenvolveram um método para a sulfonilação descarboxilativa de ácidos carboxílicos fotoinduzida utilizando catalisadores de ferro, obtendo sulfonas orgânicas (ver figura). Estes investigadores realizaram a reação de diversos ácidos carboxílicos acíclicos e cíclicos com 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano-(SO<sub>2</sub>)<sub>2</sub> (DABSO) e reagentes eletrofílicos como o brometo de alilo, usando TBAFeCl<sub>4</sub> (TBA = tetrabutilamónio) como catalisador, trietilamina como base, e diclorometano como solvente. As reações foram realizadas sob irradiação LED (390 nm) e em atmosfera de nitrogénio, à temperatura ambiente.

Com estas condições experimentais, os investigadores obtiveram as sulfonas correspondentes com rendimentos moderados a elevados. A reação ocorre com uma grande diversidade de substratos e em condições suaves. A equipa de investigação propôs um mecanismo de reação que envolve a transferência de um único eletrão do ácido carboxílico



Crédito: ChemistryViews

para Fe(III), gerando um radical RCO<sub>2</sub>·; o qual liberta CO<sub>2</sub>. O radical alquilo resultante reage com DABSO originando um intermediário do tipo RSO<sub>2</sub>·. Uma outra transferência de eletrão regenera o catalisador e produz uma espécie do tipo RSO<sub>2</sub><sup>-</sup>, que é “capturada” pelo eletrófilo, originando a sulfona respetiva.

### Fontes

Decarboxylative Sulfonation of Carboxylic Acids, [chemistryviews.org/decarboxylative-sulfonation-of-carboxylic-acids](https://chemistryviews.org/decarboxylative-sulfonation-of-carboxylic-acids) (acedido em 19/03/2024).

Y. Dong, N. Xiong, Z. Rong, R. Zeng, *Org. Lett.* **2024**, 26, 2381–2386. DOI: 10.1021/acs.orglett.4c00410.

>

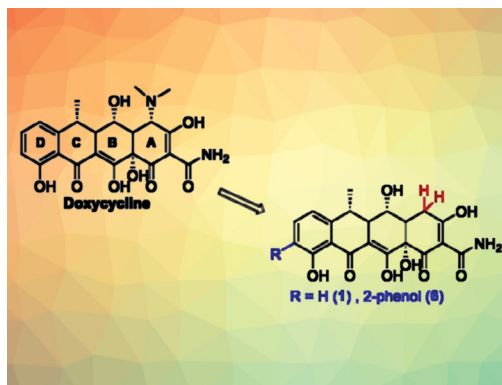
Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

# Transformação de Antibióticos em Medicamentos para a Doença de Parkinson

A doença de Parkinson (DP) é uma doença neurodegenerativa progressiva caracterizada principalmente pela perda de *substantia nigra* dos neurónios dopaminérgicos, resultando em sintomas motores característicos. Os casos diagnosticados da DP têm aumentado rapidamente, com projeções indicando um aumento significativo nas próximas décadas. A agregação da proteína pré-sináptica  $\alpha$ -sinucleína ( $\alpha$ -Syn) foi identificada como uma circunstância patológica chave na DP, tornando-a um possível alvo terapêutico para o desenvolvimento de um fármaco neuroprotetor. Os processos neuro-inflamatórios também parecem contribuir de modo crucial para a neurodegeneração na DP e a sua ativação pode depender, em parte, da agregação da  $\alpha$ -Syn. Até agora ainda não há cura para a doença de Parkinson e os medicamentos atuais tratam apenas os seus sintomas. Uma abordagem promissora consiste em retardar ou interromper a neurodegeneração usando fármacos neuroprotetores. A doxiciclina, um antibiótico semissintético com esqueleto tetraciclina, usado comumente no tratamento de infeções bacterianas, pode interromper a agregação da  $\alpha$ -sinucleína. No entanto, o seu uso durante um tempo longo apresenta riscos de desenvolvimento de resistência aos antibióticos e perturbação do microbioma intestinal.

R. Raisman-Vozari (Universidade de Sorbonne e CNRS, Paris, França), L. Ferrié, B. Figadère (Universidade Paris-Saclay e CNRS, Orsay, França) e colaboradores desenvolveram 18 novos derivados de doxiciclina na procura de tetraciclina sem propriedades antibióticas que possam constituir candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Parkinson. A equipa de investigação reduziu o grupo dimetilamino em C4 (a vermelho, na figura) com o objetivo de eliminar a atividade antibiótica e realizou reações de acoplamento



Crédito: ChemistryViews

na posição C9 do anel aromático D (a azul, na figura) para sintetizar diversos derivados.

Entre os vários candidatos a fármacos obtidos, os investigadores identificaram dois derivados da doxiciclina sem atividade antibacteriana, mas com melhores propriedades anti-inflamatórias e antiagregantes de  $\alpha$ -sinucleína em comparação com a doxiciclina (figura, R = H ou 2-fenol). Segundo a equipa de investigação, os trabalhos em curso visam investigar o potencial neuroprotetor destes compostos.

## Fontes

Turning Antibiotics into Parkinson's Drugs, [chemistryviews.org/turning-antibiotics-into-parkinsons-drugs](https://chemistryviews.org/turning-antibiotics-into-parkinsons-drugs) (acedido em 21/04/2024).

L. Ferrié, B. Figadère, C. Rose, R. H. Tomas-Grau, R. Chéhin, B. Zabala, P. P. Michel, R. Raisman-Vozari, J. -M. Brune, *ChemMedChem* **2024**, e202300597. DOI: 10.1002/cmdc.202300597.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

## Tintas à Base de Água: Menor Odor, Menor Prejuízo para a Saúde?

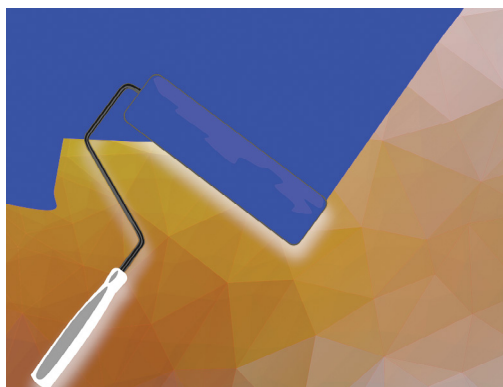
As tintas para interiores são uma fonte importante de poluentes devido à sua aplicação em grandes áreas, como tetos e paredes. As tintas “tradicionais” à base de solventes ofereciam facilidade de aplicação e durabilidade, mas libertavam compostos orgânicos voláteis (COVs), contribuindo para odores e potenciais problemas de saúde. As exigências do mercado e os requisitos regulamentares levaram a que a indústria de tintas substituisse as tintas tradicionais “à base

de solvente” por tintas “à base de água”. Nestas, a água é usada como solvente principal para resinas e pigmentos, substituindo os solventes orgânicos usados nas primeiras. Assim, as tintas de base aquosa são consideradas ecológicas, com baixo ou nenhum teor de COVs. Contudo, para atingir um desempenho comparável às tintas “tradicionais” e garantir a qualidade do produto, muitas vezes contêm vários aditivos químicos como agentes aglutinantes, agentes

emolientes, conservantes e solventes com ponto de ebulição elevado. A maior parte deles são compostos orgânicos semi-voláteis (COSVs). No entanto, foram realizados apenas alguns estudos para avaliar a liberação de produtos químicos em tintas à base de água.

Y. Xu (Universidade de Tsinghua, Pequim, China, e Universidade do Texas, Austin, EUA) e colaboradores descobriram que algumas das tintas de base aquosa podem conter COVs e outras substâncias potencialmente nocivas. A equipa de investigação analisou 40 tintas para interiores à base de água, entre as 70 marcas mais vendidas a nível mundial, muitas das quais afirmam ter nenhum ou baixo teor em COVs. A maioria das amostras de tinta era de cor branca. Nos estudos realizados, analisaram amostras secas e húmidas por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massa (GC-MS) para determinar a sua composição. Destas análises foram identificados 20 COSVs em concentrações compreendidas entre dez e 35 000 partes por milhão (ppm). Embora seja menos provável que estes compostos se encontrem em fase gasosa, podem persistir em ambientes fechados durante anos, muitas vezes incorporados no pó.

Os ftalatos, que atuam como agentes aglutinantes e que desregulam o sistema endócrino, estavam praticamente ausentes das tintas testadas. Contudo, foram detetados nestas tintas vários produtos químicos de substituição de ftalatos, tendo sido identificados, principalmente, di-isobutirato de 2,2,4-trimetil-1,3-pentanodiol (TXIB), adipato de di-isobutilo (DIBA) e bis-(2-etil-hexanoato) de trietilenoglicol (TEG-EH). As suas toxicidades ainda estão a ser avaliadas. Cerca de metade das amostras analisadas continham níveis mensuráveis de isotiazolinonas, conservantes que têm sido associados à irritação da pele e a sintomas de asma. Em 24 das amostras de tinta húmida publicitadas como livres ou de baixo teor em COVs, foram detetados 11 COVs diferentes, incluindo etilenoglicol



Crédito: ChemistryViews

e 1,2-propilenoglicol, em concentrações até 20 000 ppm. Estas concentrações correspondem à composição química da tinta e não do ar. Os investigadores dizem que são necessários mais testes para perceber a extensão das emissões atmosféricas durante a secagem. No entanto, concluem que, atendendo à exposição e aos riscos potenciais, é necessário prestar especial atenção aos produtos químicos utilizados na composição das tintas “ecológicas”. Um estudo de caso do TEG-EH sugere que o uso de tintas à base de água pode levar à exposição a COVs a longo prazo.

## Fontes

Water-Based Paints: Less Smelly, But Still Harmful?, [chemistryviews.org/water-based-paints-less-smelly-but-still-harmful/](https://chemistryviews.org/water-based-paints-less-smelly-but-still-harmful/) (acedido em 22/04/2024).

Y. Fan, Z. Song, Y. Wu, X. Ren, C. Bi, W. Ye, H. Wei, Y. Xu, *Environ. Sci. Technol. Lett.* **2024**, *87*, 606-612. DOI: 10.1021/acs.estlett.4c00052.

>

**Ana Paula Esteves**

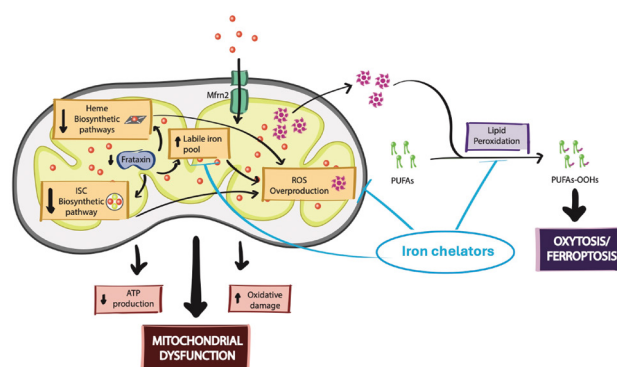
aesteves@quimica.uminho.pt

# DeFend: Desferrização da Ataxia de Friedreich com Quelantes Inovadores Direcionados para a Mitocôndria

>  
**Sofia Benfeito**  
 ester.benfeito@fc.up.pt

• • • A Ataxia de Friedreich (FRDA; ORPHA95) é uma doença neurodegenerativa progressiva e representa a forma mais comum de ataxia autossômica recessiva. Esta doença está associada a efeitos cardio- e neurodegenerativos progressivos, entre outros. Trata-se de uma doença genética rara, causada por alterações nos níveis de frataxina (FXN), uma proteína constituinte da matriz mitocondrial, que compromete a função da mitocôndria e o metabolismo energético da célula. As consequências patofisiológicas da deficiência de FXN incluem uma grave perturbação na biossíntese dos aglomerados de ferro-enxofre (FEC), acumulação de ferro mitocondrial, aumento da sensibilidade ao stress oxidativo, resultando em disfunção mitocondrial. Acresce que alguns dos mecanismos moleculares desencadeiam a oxitose/ferroptose, uma forma de morte celular induzida pelo ferro que compromete as defesas antioxidantes, originando um aumento da peroxidação lipídica e da concentração intracelular de cálcio ( $\text{Ca}^{2+}$ ). Apesar dos grandes avanços científicos, não existem fármacos aprovados que tratem efetivamente as causas subjacentes da FRDA. Diversas abordagens farmacológicas e não farmacológicas foram testadas na tentativa de encontrar uma cura,

mas, até ao momento, sem sucesso. A descoberta de novas terapias direcionadas para o tratamento da FRDA continua a ser uma grande necessidade imediata. Neste enquadramento, o projeto DeFend tem como objetivo tratar a ataxia de Friedreich por meio da descoberta e desenvolvimento de quelantes de ferro que sejam capazes de atravessar a barreira hematoencefálica e direcionados especificamente para a mitocôndria. Este projeto integra uma equipa multidisciplinar formada por investigadores desde o nível júnior até ao nível sénior com formações distintas, desde a química, a biologia, a bioquímica e a farmácia.



>  
**Ficha Técnica do Projeto**

**Sofia Benfeito**  
 (ORCID.org/0000-0001-9645-8152)

**Acronimo:** DeFend

**Financiamento:** Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT). Referência: 2022.04633.PTDC.

**Equipa:** CIQUP-IMS, FCUP - Sofia Benfeito (IR), Daniel Chavarria (co-IR), Carla Lima, Catarina Alves, Fernando Cagide, Fernanda Borges; **Salk Institute for Biological Studies** - Antonio Currais; **Center for Neuroscience and Cell Biology (CNC)** - Paulo J. Oliveira.

# Excellence in Chemistry Research



## Why publish with *ChemistryEurope*?

- Gold Open Access
- Publishing charges waived
- Preprints welcome
- Rigorous peer-review

## Meet the Editors



**Luisa De Cola**

Università degli Studi  
di Milano Statale, Italy



**Lars Christian Grabow**

University of  
Houston, USA



**Ken Tanaka**

Tokyo Institute of  
Technology, Japan



# Quinonas Como Mediadores Redox Orgânicos em Baterias Redox de Caudal

>  
Flávia Leitão  
Hugo Cruz  
Luís C. Branco\*  
Paula S. Branco\*

**Quinones as Organic Redox Mediators in Redox Flow Batteries.** *Electrochemical processes underlie the operation of electrochemical devices for energy storage and conversion. Some of these systems pose challenges such as high cost, toxicity, use of scarce metals, and recyclability, among other issues. Organic redox flow batteries (RFB) have emerged as a significant area of research, presenting a promising alternative to expensive metal-based systems like vanadium redox flow batteries. This review delves into the discussion of organic redox mediators used in redox flow batteries. The family of quinones stands out, providing suitable organic redox mediators (ORM) due to the ease of modulating molecular structures through synthesis. This adaptability addresses challenges related to redox potentials, solubility (aqueous vs. non-aqueous solution), and stability of these compounds. Over the past five years, the period covered by this review, various research groups have developed systems based on the quinone nucleus for RFB that can open up excellent prospects for the future.*

*Os processos eletroquímicos estão subjacentes ao funcionamento dos dispositivos eletroquímicos para armazenamento e conversão de energia. Alguns destes sistemas apresentam problemas, como elevado custo, toxicidade, uso de metais pouco abundantes, reciclabilidade, entre outros. As baterias redox de caudal (BRC) orgânicas tornaram-se um importante tópico de pesquisa na última década como uma alternativa bastante promissora a sistemas baseados em metais caros como as BRC de vanádio. Nesta revisão discute-se o uso de mediadores redox orgânicos (MRO) em BRC. A família das quinonas destaca-se dada a facilidade de modulação da estrutura molecular resolvendo problemas associados aos potenciais redox, à solubilidade (solução aquosa vs. não aquosa) e estabilidade destes compostos. Nos últimos quatro anos, período a que reporta esta revisão, diferentes grupos desenvolveram sistemas baseados no núcleo quinona para BRCs que podem abrir excelentes perspectivas para o futuro.*

## Introdução

O avanço das tecnologias associadas à captura e armazenamento das energias renováveis e de zero emissões carbono (*carbon-free*) ainda não é totalmente competitivo com as fontes tradicionais, sendo crucial impulsionar essa procura para garantir o desenvolvimento sustentável do planeta [1,2]. Neste contexto, é fundamental para o nosso futuro uma captura, conversão e armazenamento efetivos de fontes de energia alternativas - Energia Limpa e Acessível como Objetivo de Desenvolvimento Sustentável (ODS) 7 - um dos 17 ODS adotados em 2015 pela comunidade internacional como parte da Agenda 2030 para o Desenvolvimento Sustentável [3]. Neste caminho a sustentabilidade deve ser uma prioridade para o desenvolvimento e implementação dessas tecnologias [2,4,5]. Apesar da recolha de energia a partir de fontes renováveis, como a solar e a eólica, ter acelerado significativamente na

última década, é crucial que esta energia limpa e barata seja armazenada e libertada sempre que necessário. Algumas destas tecnologias alternativas para a conversão ou armazenamento de energia baseiam-se em processos de mediação redox [6,7]. Os mediadores redox são espécies químicas capazes de atuar como "reservatórios ou transportadores de eletrões", que sofrem processos de oxidação-redução reversíveis através da transferência de eletrões entre um substrato e um eletrodo num processo eletroquímico [8]. Até à data, os metais de transição, que são escassos, têm sido utilizados em dispositivos de armazenamento de energia, desde baterias portáteis de iões lítio (que usam cobalto e níquel) ou baterias redox de caudal (BRC) em grande escala (que usam vanádio) [9,10]. O uso de metais de transição caros e pesados torna a redução significativa de custos implausível, sendo este

um fator limitativo na diminuição do custo da energia. Além disso, a utilização em larga escala de metais (ex. lítio, cobalto e níquel) não é sustentável a longo prazo, levantando potenciais questões devido aos processos de extração e processamento desses materiais serem intensivos em consumo de energia e poderem causar danos ambientais. Além disso, os materiais inorgânicos são muitas vezes não renováveis e, uma vez extraídos, não podem ser regenerados. A este respeito, vários sistemas de baterias foram recentemente desenvolvidos baseados em novos materiais para tecnologias sustentáveis de armazenamento de energia [4,7,11,12].

Os processos redox estão na base de muitos dispositivos eletroquímicos, como as células solares sensibilizadas por corantes (DSSC do inglês *Dye Sensitized Solar Cells*) [13,14], baterias orgânicas [15,16] e células eletrocromáticas [17]. O desempenho desta tecnologia depende de muitos fatores, tais como a reatividade do MRO, a interface entre os eletrodos e os substratos e a configuração das células eletroquímicas. Uma propriedade importante dos mediadores redox presentes nos eletrólitos é a sua reversibilidade eletroquímica para permitir o transporte de carga através da camada mediadora com maior produtividade.

MRO, como o nome indica, são moléculas orgânicas capazes de mediar processos de transferência de elétrons, apresentando diversas vantagens face aos mediadores redox inorgânicos tradicionais. Os MRO são normalmente, do ponto de vista sintético, mais econômicos e mais facilmente disponíveis, biodegradáveis e podem ser produzidos a partir de recursos renováveis [18]. Apresentam também uma maior solubilidade em eletrólitos líquidos, o que pode aumentar a eficiência geral do sistema de conversão ou armazenamento de energia. Além disso, os MRO são frequentemente mais estáveis do que os mediadores redox inorgânicos, o que pode prolongar o tempo de vida dos sistemas de conversão ou armazenamento de energia [18]. Nos últimos anos, os MRO aquosos e não aquosos [19] surgiram para superar os inconvenientes associados a eletrólitos baseados em materiais tóxicos ou perigosos e que apresentam baixas densidades energéticas.

Uma BRC é um dispositivo de armazenamento de energia eletroquímica que converte energia química em energia elétrica através da oxidação e redução reversível de fluidos (Figura 1) [16]. Apresentam como vantagens um tempo de vida útil longo, escalabilidade teoricamente ilimitada e longos tempos de descarga. Além disso, nas BRC os materiais redox ativos dissolvidos são armazenados separadamente em tanques externos e são introduzidos através de bombas para a célula eletroquímica que compõe a bateria, o que torna a configuração dissociada das BRCs altamente flexíveis em capacidade e *design* de componentes [20]. Os MROs são uma alternativa promissora aos

eletrólitos à base de metais para BRC devido ao baixo custo (em comparação com sistemas de vanádio) e operação de alto desempenho [8,15]. Um MRO para este fim pode ser cuidadosamente projetado com grupos funcionais adequados (com propriedades de doação ou aceitação de elétrons), para atingir uma elevada solubilidade. As quinonas são um grupo de compostos com alto desempenho em BRC aquosas que são facilmente ajustados por derivatização. Alguns mediadores redox com estrutura baseada no núcleo quinona apresentam resultados próximos aos relatados para BRC de vanádio [15,21,22]. Outros MRO descritos na literatura envolvem derivados de benzofenona [23], *N*-oxil-2,2,6,6-tetrametilpiperidina (TEMPO) [24,25], sistemas mistos com 9-fluorenona, 2,1,3-benzotiazole e 2,5-di-*terc*-butil-1-metoxi-4-[2'-metoxietoxi]benzeno (DBMMB) [26,27].

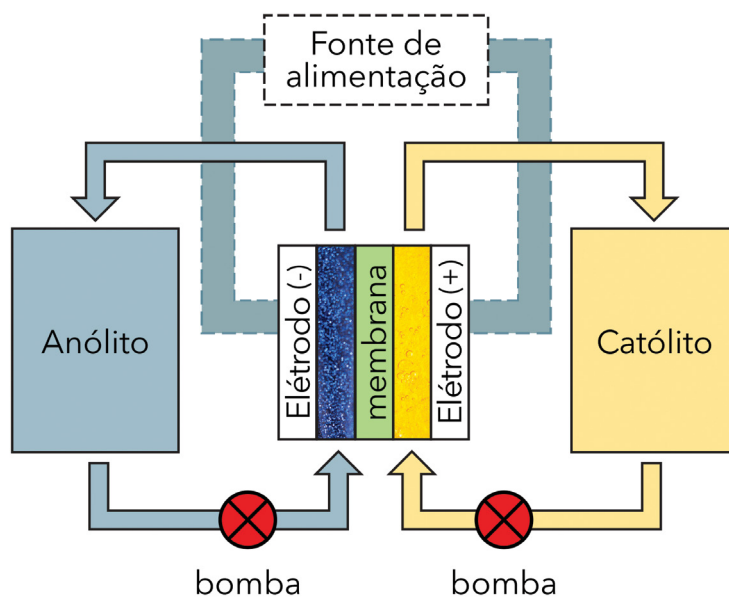
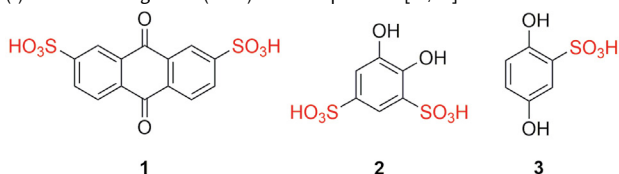


Figura 1 - Esquema de uma bateria redox de caudal (BRC).

As baterias redox de caudal orgânicas (BRCO) têm sido alvo de intensa investigação como uma alternativa sem necessidade de utilização de metais (*metal-free*) e de baixo custo às BRC de vanádio [28-30]. Estas baterias ganharam um impacto maior após ter surgido a primeira BRC *metal-free* orgânica-inorgânica aquosa descrita em 2014 por Huskinson *et al.* [31]. Nesta bateria, a espécie redox ativa, o ácido 9,10-antraquinona-2,7-dissulfônico (AQDS, **1**) (Figura 2) atuou como o anólito acoplado ao par redox  $\text{Br}_2/\text{Br}^-$  que atuou como o católito. Antes desta bateria, Xu *et al.*, em 2009, reportaram conceptualmente uma BRC na qual dois compostos hidroquinonoides semelhantes foram propostos como MROs, o 4,5-di-hidroxi-1,3-benzenodissulfonato (tiron, **2**) e o 2,4-di-hidroxi-benzenodissulfonato

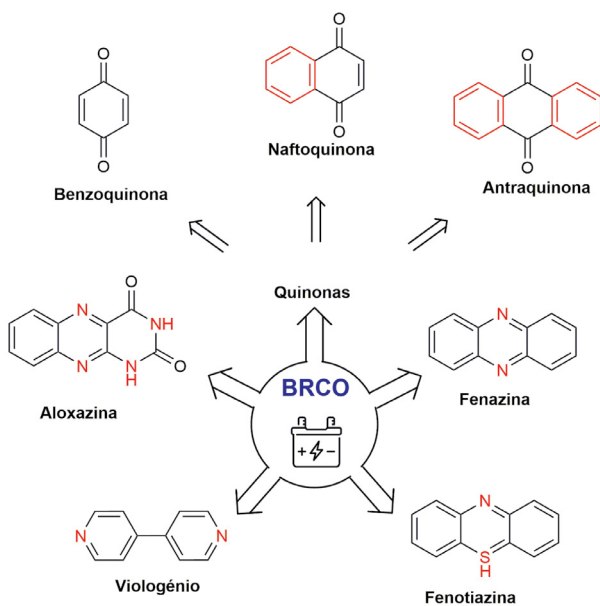
(quinol sulfônico, **3**) (Figura 2), ambos atuando como material positivo e  $\text{PbSO}_4/\text{Pb}$  como eletrodo negativo em soluções aquosas de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  com uma membrana de troca iônica entre os eletrólitos positivo e negativo [32]. Este tipo de compostos pode ser facilmente manipulado do ponto de vista sintético para aumentar os potenciais redox e a solubilidade em água. Dentro das BRCO, podem ser encontrados dois tipos de baterias, as aquosas [33] e as não aquosas [19].

Figura 2 - Primeiro MRO descrito para uma BRCO *metal-free* (**1**) e estruturas orgânicas (**2** e **3**) descritas para BRC [31,32].



As baterias redox de caudal orgânicas aquosas (BRCOA) têm a grande vantagem de não utilizar solventes voláteis e inflamáveis. Os eletrólitos usados nas BRCOA são mais simples e baratos em comparação com eletrólitos não aquosos, permitindo maior eficiência [33-35]. A investigação e desenvolvimento em torno deste tipo de baterias tem o seu foco em várias famílias de compostos tais como quinonas, fenazinas, fenotiazinas, viologénio e aloxazina (Figura 3) [36,37].

Figura 3 - Algumas das famílias mais estudadas como potenciais materiais redox orgânicos em baterias redox de caudal orgânicas (BRCO).



Neste artigo serão abordados os desenvolvimentos nos últimos cinco anos (2019 a 2024) dos MRO baseados em quinonas comparando com a eficiência de sistemas metálicos padrão para aplicações em BRC.

## Progressos recentes em BRCO baseadas em quinonas

As quinonas têm sido amplamente exploradas para serem utilizadas em BRCO [38,39]. Para tal contribui a fácil reversibilidade na interconversão redox entre quinona e hidroquinona com potenciais de eletrodo elevados [40], já reconhecidos em biotransformações redox [41]. Dentro da família das quinonas, são conhecidos três núcleos principais, benzoquinona, naftoquinona e antraquinona. Os mais estudados são os núcleos de benzoquinona e antraquinona, em oposição aos poucos registos referentes às naftoquinonas [42]. Este facto pode ser justificado pela reduzida estabilidade da naftoquinona e os seus baixos potenciais de redução [42]. Nos anos que se seguiram aos trabalhos de Xu *et al.*, em 2009 [32] e Huskinson *et al.* em 2014 [31], várias quinonas foram estudadas para aplicações em BRCO aquosas e não aquosas [43-48].

As principais desvantagens desta família de compostos incluem a baixa solubilidade e estabilidade em meio aquoso. As benzoquinonas são suscetíveis de sofrer adição de Michael por moléculas de água com concomitante rearomatização do anel [30,49]. As antraquinonas sulfonadas também são propensas a sofrer dimerização, incapacitando uma transformação redox completa [30]. Já as hidroquinonas são suscetíveis a sofrer oxidação pelo oxigénio molecular para originar as respetivas quinonas [30,37].

Na Figura 4 são apresentadas as quinonas/hidroquinonas reportadas na literatura nos últimos quatro anos no desenvolvimento de MRO.

### Benzoquinona/Hidrobenzoquinona

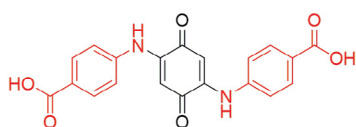
Jethwa *et al.* [50] estudaram a aplicabilidade de uma benzoquinona (BQ) bifuncionalizada com grupos carboxi-anilina (**4**, Figura 4) para ser utilizada como MRO numa BRCOA. Como observado com outras BQs, a quinona **4** é também suscetível de sofrer adição de moléculas de água. No entanto, neste caso, isso levou a uma melhoria da estabilidade da molécula, com a vantagem de diminuir o seu potencial de redução. A BQ **4** apresentou inicialmente um potencial de redução de  $-0,32$  V vs. Eletrodo Padrão de Hidrogénio (SHE, do inglês *Standard Hydrogen Electrode*), no entanto, após a adição de água, que provoca a perda do esqueleto quinona, apresentou um potencial de redução de  $-0,69$  V vs. SHE. Quando aplicada numa BRC contra ferri/ferrocianeto foi exibida uma tensão de circuito aberto de  $1,1$  V com uma eficiência próxima de 100% [50]. Uma tiantreno-quinona (**5**, Figura 4) reportada por Etkind *et al.* foi utilizada numa BRCO simétrica (*i. e.*, com idêntica composição eletrolítica em ambos os lados o que é uma estratégia para mitigar a degradação induzida por *crossover*). Foram apresentados dois voltamogramas cíclicos distintos, um correspondente

à redução da quinona, com potenciais de redução de -0,72 V e -1,42 V vs. Fc/Fc<sup>+</sup> (par redox ferroceno/ferrocínio), e o outro correspondente à oxidação do tiantreno, com potenciais de oxidação de 0,86 V e 1,07 V vs. Fc/Fc<sup>+</sup>. Em termos de estabilidade, esta quinona sofreu apenas uma perda de capacidade mínima durante 100 ciclos, e após 450 ciclos 44% da sua capacidade foi mantida [51].

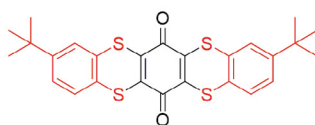
Gerken *et al.* [21] estudaram a estabilidade, solubilidade e aplicabilidade de diferentes hidrobenzoquinonas (HBQ) mono, di, tri e tetrassubstituídas em BRCOA (**2 e 3**, Figura 2 e **6-11**, Figura 4). A substituição por grupos tioéter causou uma ligeira diminuição no potencial de redução devido à sua natureza doadora de elétrons. A HBQ **3** mostrou-se a mais instável de entre todas as HBQ, com um aumento da sua estabilidade

## Benzoquinona (BQ)/Hidrobenzoquinona (HBQ)

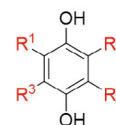
Figura 4 - Quinona/hidroquinonas reportadas na literatura nos últimos cinco anos no desenvolvimento de MRO.



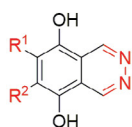
(4)



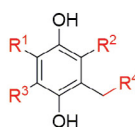
(5)



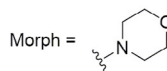
- (6)  $R^1 = R^2 = \text{Me}$ ,  $R^3 = \text{H}$ ,  $R^4 = \text{SO}_3\text{H}$   
 (7)  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 = \text{S}(\text{CH}_2)_3\text{SO}_3\text{H}$   
 (8)  $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 = \text{S}(\text{CH}_2)_2\text{SO}_3\text{H}$   
 (9)  $R^1 = R^2 = R^3 = \text{S}(\text{CH}_2)_2\text{SO}_3\text{H}$ ,  $R^4 = \text{H}$   
 (10)  $R^2 = \text{S}(\text{CH}_2)_2\text{SO}_3\text{H}$ ,  $R^1 = R^3 = R^4 = \text{H}$   
 (11)  $R^1 = R^4 = \text{H}$ ,  $R^2 = R^3 = \text{SO}_3\text{H}$



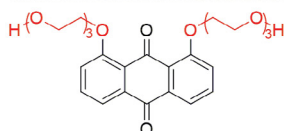
- (12)  $R^1 = R^2 = \text{H}$   
 (13)  $R^1 = \text{OMe}$ ,  $R^2 = \text{H}$   
 (14)  $R^1 = R^2 = \text{Me}$



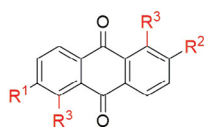
- (15)  $R^1 = R^2 = R^3 = \text{Me}$ ,  $R^4 = \text{Morph}$   
 (16)  $R^1 = R^4 = \text{Morph}$ ,  $R^2 = R^3 = \text{H}$   
 (17)  $R^1 = R^4 = \text{Morph}$ ,  $R^2 = R^3 = \text{Me}$   
 (18)  $R^1 = R^2 = \text{Me}$ ,  $R^3 = R^4 = \text{Morph}$



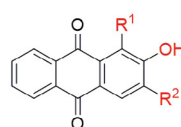
## Antraquinona (AQ)



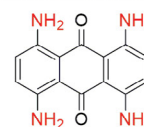
(19)



- (20)  $R^1 = R^2 = \text{OH}$ ,  $R^3 = \text{H}$   
 (21)  $R^1 = R^2 = \text{OCH}(\text{CH}_3)\text{CO}_2\text{H}$ ,  $R^3 = \text{H}$   
 (22)  $R^1 = R^2 = \text{O}(\text{CH}_2)_3\text{PO}_3\text{H}_2$ ,  $R^3 = \text{H}$   
 (23)  $R^1 = R^3 = \text{H}$ ,  $R^2 = \text{OCH}(\text{CH}_3)\text{CO}_2\text{H}$   
 (24)  $R^1 = \text{H}$ ,  $R^2 = \text{SO}_3\text{H}$ ,  $R^3 = \text{H}$   
 (25)  $R^1 = R^2 = (\text{CH}_2)_2\text{CO}_2\text{H}$ ,  $R^3 = \text{H}$   
 (26)  $R^1 = R^2 = \text{N}((\text{CH}_2)_3\text{SO}_3\text{Na})_2$ ,  $R^3 = \text{H}$

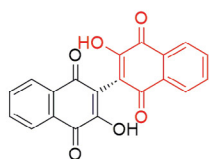


- (27)  $R^1 = \text{OH}$ ,  $R^2 = \text{H}$   
 (28)  $R^1 = \text{OH}$ ,  $R^2 = \text{SO}_3\text{H}$   
 (29)  $R^1 = \text{H}$ ,  $R^2 = \text{SO}_3\text{H}$



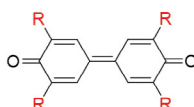
(30)

## Naftoquinona (NQ)



(31)

## Difenoquinona (DPQ)



- (32)  $R = \text{H}$   
 (33)  $R = \text{Me}$   
 (34)  $R = t\text{-Bu}$   
 (35)  $R = \text{Cl}$   
 (36)  $R = \text{Br}$

à medida que o número de substituições aumentou, com as HBQ tetra-substituídas com grupos tioéter sulfonado (**7** e **8**) a terem uma maior estabilidade. As HBQs **7** e **8** apresentaram potenciais redox de 0,605 V e 0,618 V vs. SHE, respectivamente. O composto **6** (católito) foi conjugado com AQDS (**1**) (anólito) e testado numa BRCOA, tendo apenas sido observada a perda de 2% de capacidade após 50 ciclos. Embora estes sejam ótimos resultados, os potenciais de redução são muito baixos e, portanto, modificações nessas HBQ devem ser realizadas para aumentar esses potenciais [21]. Um grupo de moléculas com similaridade estrutural à naftoquinona, as 5,8-di-hidroxi-2,3-ftalazinas (**12-14**, Figura 4) exibindo um anel heterocíclico foram estudadas por Hofmann *et al.*, como um possível católito em BRCOA [52]. O composto **12** apresentou um potencial redox de 0,796 V vs. SHE em H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1 M. Dois outros derivados foram sintetizados, os compostos **13** e **14**, com potenciais redox de 0,722 V e 0,691 V vs. SHE, respectivamente. Quando comparados com os potenciais de redução de *p*-HBQ, *o*-HBQ e o sal dissódico do composto **2**, os compostos **12-14** mostraram ter menores potenciais de redução. Em termos de estabilidade, estes derivados de ftalazinas também são passíveis de sofrer adição de Michael por moléculas de água. No entanto, para o composto **14** a presença dos dois grupos metilo impediu a adição de água, melhorando assim a estabilidade da molécula [52]. Yang *et al.* [53] estudaram as propriedades eletroquímicas de quatro HBQs diferentes funcionalizadas com grupos morfolina (**15-18**, Figura 4) que se mostraram boas alternativas para serem utilizados como católito para BRCOA. A voltametria cíclica (VC) da HBQ **16** dissubstituída com dois grupos morfolino revelou ser irreversível e estudos de estabilidade mostraram uma perda de capacidade de 71% em menos de dois dias. Os autores continuaram os estudos com esta HBQ para compreender melhor a sua decomposição e identificaram o ácido 2,5-dioxotereftálico como o produto da decomposição da hidrobenzoquinona **16**. As HBQ tetra-substituídas **15**, **17** e **18** apresentaram maior estabilidade com perda de capacidade de 7,3, 0,87 e 0,45% por dia, respectivamente. As vantagens destas HBQs tetrassubstituídas não terminam com a avaliação da sua estabilidade. Outros estudos também evidenciaram as propriedades redox, possuindo potenciais redox de 0,314 V, 0,412 V e 0,422 V vs. Ag/AgCl, para **15**, **17** e **18**, respectivamente. Estes resultados comprovam, mais uma vez, a importância da substituição total das BQ/HBQ para melhorar a sua estabilidade [53]. Xu *et al.* [54] reportam avanços para BRCOA baseado em compostos orgânicos adsorvidos, Tirion (**2**, Figura 2) como católito e AQDS (**1**) para o anólito. Estas quinonas foram adsorvidas em eletrodos de carbono porosos com elevada área superficial. Esta bateria à base de

quinonas adsorvidas, operando numa solução de ácido sulfúrico, fornece uma capacidade de 70% após 600 ciclos. A adsorção de materiais ativos redox provou ser eficaz e permite um armazenamento de carga estável e quimicamente reversível para BRCOA. Esta metodologia pode ser uma alternativa de baixo custo quando materiais orgânicos redox estáveis são aplicados em condições ótimas [54].

### Antraquinonas

O grupo de Aziz [55] reportou uma série de antraquinonas (AQs) funcionalizadas com grupos trietilenoglicol (PEG), com elevada solubilidade em água, para serem usadas como anólitos em BRCOA. Dos estudos cinéticos, realizados com VC, destaca-se uma AQ funcionalizada nas posições 1 e 8 (**19**, Figura 4). Quando acoplado com ferri/ferrocianeto de potássio (católito) apresenta uma tensão de circuito aberto de 1,0 V. Também foi observada uma dependência dos potenciais de redução com o pH. Em pH 7 o potencial de redução foi de -0,43 V vs. SHE e em pH 14 foi de -0,52 V vs. SHE. Quanto à eficiência, após 220 ciclos foi exibida uma eficiência de 99,90%, com uma taxa de decaimento da capacidade de 0,043% por ciclo e 0,5% por dia. A fonte de perda de eficiência foi a decomposição do AQ por desoxigenação à antrona, com concomitante dimerização [55]. Os produtos de decomposição encontrados estavam de acordo com estudos de desproporção realizados pelo grupo, mas também por trabalhos de Wang e Ahlberg [56] e de Goulet [57] nos estudos dos mecanismos de decomposição das AQs **20** e **21** (Figura 4). A formação e dimerização irreversível da antrona, foi identificada como a fonte de perda de capacidade de BRC à base de AQ, uma vez que o produto de desproporção não é uma espécie ativa redox. Essa desproporção está correlacionada com os potenciais redox da AQ. Yang e Xu [58] usaram como estratégia para prolongar a vida útil da antraquinona **20** a incorporação de catiões tetrametilamónio ([TMA]<sup>+</sup>) nos eletrólitos de suporte para interferir com a estrutura de solvatação dos aniões, desativando assim a redução química que está na base das reações laterais subsequentes. A taxa de decaimento da capacidade das células antraquinona (**20**)/K<sub>4</sub>Fe(CN)<sub>6</sub> causada pela decomposição eletrolítica de uma solução 0,1 M de **20** diminui quase uma ordem de magnitude, de 5,34% por dia sem presença de [TMA]<sup>+</sup> para 0,65% por dia com 4,5 M de [TMA]<sup>+</sup>. Esta estratégia é ainda eficaz quando a concentração de **20** é de 0,4 M. Dados computacionais revelaram que pode ser benéfico recorrer a AQs com maior potencial de redução, a fim de preservar a sua estabilidade e, portanto, reduzir o decaimento da capacidade da bateria [57]. No estudo de Wang e Ahlberg foi observado que o aumento da temperatura do sistema era benéfico para diminuir o processo de dimerização [56]. O grupo

de Aziz também refere uma AQ bastante promissora funcionalizada com grupos ácido fosfónico (**22**, Figura 4) para BRCOA tendo estudado a sua solubilidade e estabilidade em água [59]. Os autores verificaram que a AQ apresentou elevada solubilidade em água e estabilidade em pH 9 ou superior observando que o pH afetou ligeiramente o potencial de redução (-0,47 V vs. SHE em pH 9 e -0,49 V vs. SHE em pH 12), semelhante ao observado para AQ **21**. A AQ foi testada como anólito acoplado a ferri/ferrocianeto de potássio como católito, exibindo uma tensão de circuito aberto de 1,0 V e uma taxa de decaimento de capacidade muito baixa (0,00036% por ciclo e 0,014% por dia). Embora esse grupo não afete positivamente o potencial redox da AQ, o facto de o grupo ácido fosfónico não estar diretamente ligado ao anel mostrou-se crucial para a estabilidade [59].

Será importante realçar que a compreensão da decomposição química de eletrólitos de BRC é essencial para desenvolver novos materiais eletrólitos mais resistentes [60].

Mais recentemente, Aziz e colaboradores [61] reportaram uma antraquinona monossustituída (**23**) muito estável e solúvel para aplicação como anólito em BRCOA. A antraquinona **23** apresentou um decaimento de 0,03-0,05% por dia quando sujeita a diferentes densidades de corrente aplicada, janelas de tensão e concentrações variáveis entre 0,1 e 1,0 M em ambas as células com ferri/ferrocianeto como católito. A antraquinona **23** mostrou ainda ser extremamente estável a longo prazo, perdendo apenas aproximadamente 0,01% por dia.

Estudos de estabilidade, condutividade, viscosidade e solubilidade em ácido sulfúrico foram realizados para quatro AQs diferentes, ácido antraquinona-2,6-dissulfónico (**21**), ácido antraquinona-2-sulfónico (**24**) (Figura 4), ácido 4,5-di-hidroxibenzeno-1,3-dissulfónico (**2**) e ácido antraquinona-2,7-dissulfónico (**1**), (Figura 2), por Bauer *et al.* em 2020, a fim de atender às especificações de parâmetros encontrados em BRC de vanádio [62]. Os resultados mostraram que para maior concentração de soluções de ácido sulfúrico, a solubilidade da AQ diminui e que, a concentração de espécies ativas redox influencia tanto a condutividade quanto a viscosidade da solução. Com concentrações maiores de AQ foi observada uma diminuição na condutividade e um aumento da viscosidade e, consequentemente, uma diminuição na voltagem da célula. A estabilidade eletroquímica dos compostos **1** e **2** foi determinada após 30 ciclos de carga/descarga tendo o composto **2** mostrado maior estabilidade em contraste com **1**, o qual sofreu a adição de água levando a uma perda de desempenho da célula [62]. Também a solubilidade de diferentes sais de AQs sulfonadas foi estudada variando o contra-íon utilizado ( $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ ,

$\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ). Este estudo, conduzido por Mao *et al.* [63], revelou que os sais de magnésio das AQs apresentavam maior solubilidade. Porém, a concentrações mais elevadas destes sais de magnésio de AQs e após a redução, observaram a formação de um precipitado. O aumento da solubilidade está também dependente do número e posição de grupos sulfonato tendo os sais da 2,7-antraquinona-dissulfonato (**1**, Figura 2), apresentado uma maior solubilidade por comparação com a AQ **21** (Figura 4) e ambas, maior solubilidade que o monossulfonato, a AQ **24**. Este facto pode ser justificado tendo por base as energias de hidratação. Do balanço energético, a hidratação do **1** é favorecida, devido à sua carga, originando mais cátions em solução. Num outro trabalho, Jing *et al.* [64] procederam à síntese e caracterização eletroquímica de vários AQs. A AQ derivatizada com o ácido propiónico (**25**, Figura 4) destaca-se como a mais promissora em termos de estabilidade e solubilidade, devido à presença do grupo carboxilato e ao facto deste grupo estar separado do anel por uma cadeia saturada. A AQ **25** apresentou um potencial de redução de -0,456 V vs. SHE. Este anólito foi usado contra o católito (ferri/ferrocianeto) tendo demonstrado uma baixa perda de capacidade de 0,0128-0,025% por dia [64]. Noutro trabalho, o grupo reportou uma AQ amino-funcionalizada (**26**, Figura 4), com potencial de redução de -0,63 V vs. SHE. Esse potencial de redução foi menor devido ao caráter eletrodoador do grupo amina. Quando acoplado com ferri/ferrocianeto apresenta uma tensão de circuito aberto de 1,14 V, juntamente com uma taxa de decaimento de capacidade de 0,025% por dia e uma eficiência de cerca de 100%. A taxa de decomposição da AQ **26** pareceu ser dependente do pH, tendo sido observada uma elevada taxa de decomposição a pH neutro, mas em meio básico a decomposição foi mínima [65]. Uma BRCOA de quinona foi reportada usando o corante natural alizarina (**27**, Figura 4) como espécie redox ativa. Essa molécula tem a capacidade de atuar, tanto como o católito quanto o anólito. Isso acontece devido ao padrão de substituição único, permitindo que a *p*-quinona seja usada como anólito e a *o*-quinona como católito. No entanto, a alizarina apresenta como desvantagem ser uma molécula insolúvel em água. O derivado sulfonato, vermelho de alizarina S (**28**, Figura 4), também se mostrou instável em estudos de VC. Quando pré-adsorvida ao eletrodo papel de carbono, a VC mostrou um processo redox reversível. O mesmo resultado foi observado para **27** quando nas mesmas condições experimentais. Uma BRC com alizarina como MRO adsorvida em ambos os lados da bateria exibiu uma tensão de circuito aberto de 1,04 V com uma capacidade de retenção de 45% após 100 ciclos, com uma profundidade de descarga aplicada de 100% [66]. Guiheneuf *et al.*

[67] também estudaram as propriedades da AQ **28**, revelando um potencial de redução de  $-0,99$  V vs. Ag/AgCl para esta quinona. Quando na forma de sal de sódio e potássio observou-se que, neste último caso, foi possível aumentar a solubilidade da AQ em água, mas diminuiu a retenção da capacidade. Em termos de retenção de capacidade, o sal de sódio mostrou ser mais promissor pois permitiu a operação por 11 meses com mínima perda de capacidade. O grupo também notou a formação de um produto de hidredesoxigenação, a quinona **29** (Figura 4), com grande estabilidade e que teve pouca interferência na capacidade da bateria [67].

Num outro trabalho, uma BRCOA baseada no vermelho alizarina S (**28**) e ferrocianeto de potássio foi estudada em meio alcalino. O teste de estabilidade eletroquímica do par redox mostrou que o anólito **28**, mesmo quando submetido a condições extremas de potencial e corrente, não perde a sua atividade redox e exibe um bom desempenho sem perdas significativas de eficiência num teste de célula única. A BRCOA mostrou ser estável com uma capacidade média de armazenamento de  $5,9$  mWh L<sup>-1</sup> e capacidade de retenção de 89 e 91,5% para um teste de célula única antes e após o teste de estabilidade, respectivamente [68]. Num trabalho recente [69], o mesmo grupo desenvolveu BRCOA baseadas no vermelho alizarina S (**28**) como anólito e o sal dissódico do ácido 4,5-dihidroxi-1,3-benzenodissulfônico mono-hidratado (**2**) como católito em meio ácido e, usando membranas poli(éter-éter-cetona) sulfonadas (SPEEK), com e sem pré-tratamento. Numa comparação com a membrana comercial Nafion® 115, os autores verificaram que as membranas sem pré-tratamento apresentavam uma maior *performance* e capacidade de retenção. As eficiências coulombicas, voltaicas e energéticas médias, a densidade e capacidade de energia de descarga e a capacidade de armazenamento apresentaram resultados semelhantes, com o acréscimo de que a SPEEK sem pré-tratamento apresentou maior capacidade de retenção (73%). O estudo destaca o grande potencial do uso de membranas baratas sem pré-tratamento e materiais ativos de baixo custo para aplicação em BRCOAs [69].

Pahlevaninezhad *et al.* [70] reporta uma tetra-aminoantraquinona (**30**, Figura 4) para ser usada como material ativo redox em BRCO não aquoso. A AQ **30** tem a capacidade de fazer transferência multieletrônica de  $4e^-$  para a oxidação e  $2e^-$  para a redução, resultados que foram sustentados por cálculos da teoria funcional da densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*). Isto foi confirmado por VC, apresentando voltamogramas com picos quase reversíveis, com potenciais de redução mais negativos que a maioria das quinonas já descritas,

variando de 3,2 V a 4,4 V vs. Li. Quando testada numa BRC, a AQ produziu uma eficiência energética de 71% com 100% de capacidade de retenção após 50 ciclos de carga-descarga [70].

### Naftoquinona

Os esforços desenvolvidos pelo grupo de Aziz para melhorar as naftoquinonas (NQ) como materiais redox ativos para serem usados em BRCOA como anólito envolveram a dimerização da 2-hidroxi-1,4-naftoquinona (*lawsone*) para obter a quinona **31** (Figura 4). Foi possível melhorar a estabilidade, reversibilidade eletroquímica, tensão da célula e solubilidade da NQ. A quinona **31** acoplada ao ferri/ferrocianeto exibiu uma tensão de circuito aberto de 1,05 V com potencial de redução de  $-0,551$  V vs. SHE. A dimerização da *lawsone* permitiu que o potencial de redução se tornasse mais negativo com maior tensão da célula. Foi também observada uma perda de capacidade de 14,8% ao longo de 21 dias de operação, identificando o produto de tautomerização como a fonte da perda de capacidade da bateria [42].

### Difenoquinona

Um grupo de difenoquinonas (DFQ) (**32-36**, Figura 4) foi estudado por Néron *et al.*, para potencial uso em BRC, utilizando ferramentas eletroquímicas e computacionais. Os resultados da VC revelaram um comportamento muito semelhante ao observado nas BQs, mesmo em termos de decomposição. As DFQs também são passíveis de sofrer adição de água e dimerização, como observado em outras quinonas descritas anteriormente. Quando comparadas às BQ, as DFQ apresentam maiores potenciais de redução. A DFQ **32** não substituída produziu potenciais de redução de  $-0,608$  V e  $-0,787$  V vs. Fc/Fc<sup>+</sup>. Os grupos doadores de elétrons diminuíram os potenciais de redução, como observado para as DFQs **33** e **34**, enquanto as DFQs **35** e **36** revelaram um aumento no potencial de redução devido aos grupos eletroatratores [71].

### Estudos computacionais

Nos últimos anos, os estudos computacionais também têm sido extremamente importantes na busca de materiais redox orgânicos adequados para serem usados em BRCO aquosas e não aquosas [72]. Maioritariamente, os estudos são conduzidos para entender melhor a estabilidade da quinona e delinear moléculas que melhor se ajustem a todas as especificações exigidas para que essas baterias possam competir com BRC baseadas em metais [73-75], nomeadamente, que abordem a influência de diferentes geometrias e grupos ligados aos anéis e o efeito nos potenciais redox das quinonas [73,76-78].

Neste contexto surge a eletroquímioinformática,

uma disciplina que lida com a aplicação de tecnologias de informação, especificamente ciência de dados, *machine learning* (ML) e inteligência artificial, para resolver problemas relacionados com os processos eletroquímicos, incluindo o desenvolvimento de materiais e dispositivos eletroquímicos. Baskin e Ein-Eli [79] abordam o uso da eletroquímioinformática na ciência e tecnologia de baterias, incluindo o desenvolvimento de materiais eletrólitos e elétrodos, monitorização do desempenho de baterias, modelação e *design*. Num trabalho recente de Hashemi e colaboradores [80], modelos de ML foram usados para prever reações de transferência de protões-eletrões e analisar o espaço molecular. Os dados para ML foram criados por cálculos DFT. O conjunto de dados contém mais de 8200 moléculas orgânicas do tipo quinona que sofreram duas reações de transferência de protões e duas de eletrões. Modelos treinados usando um descritor estrutural baseado em SMILES conseguem prever eficientemente o  $pK_a$  e a  $E_{red}$  com um erro absoluto médio inferior a 1 e 66 mV, respetivamente. Este estudo híbrido DFT-ML pode ser aplicado para acelerar a triagem de moléculas do tipo quinona para armazenamento de energia e outras aplicações.

Outros autores propuseram um procedimento computacional para uma avaliação sistemática de espécies orgânicas redox-ativas combinando ML, cálculos de mecânica-quântica e DFT gerando 1517 quinonas, nomeadamente benzoquinona, naftoquinona e antraquinona com diferentes grupos substituintes [81]. Os métodos foram usados para prever diferenças HOMO-LUMO e energias livres de solvatação que explicam as diferenças de potencial redox e solubilidade aquosa, respetivamente. O procedimento computacional foi capaz de gerar materiais eletrólitos catódicos de elevado desempenho consistentes com observações experimentais e identificar novos eletrólitos para BRCs através da triagem de 100000 moléculas de quinona dissubstituídas.

### Conclusões e Perspetivas Futuras

A utilização de mediadores redox à base de metais

para incorporação em dispositivos de armazenamento de energia pode tornar-se num problema de sustentabilidade para as gerações futuras. A tecnologia eletroquímica mais promissora para o armazenamento de energia em larga escala poderá passar pela utilização de MRO em BRC sendo o seu baixo custo e a sua elevada segurança fatores determinantes. As limitações mais importantes para a aplicação mais vasta de BRCO são a baixa solubilidade em água, a reduzida estabilidade eletroquímica e a permeabilidade através da membrana dos MRO. Os MRO da família das quinonas apresentam um *design* flexível, maior estabilidade e propriedades eletroquímicas facilmente adaptadas em comparação com outros sistemas. As propriedades físico-químicas e eletroquímicas destes materiais orgânicos podem ser facilmente modificadas de um modo efetivo pela introdução de grupos funcionais adequados. Por essa razão, observa-se nos últimos anos um interesse considerável no potencial das quinonas como uma categoria promissora de espécies eletroativas para uso em BRCO. Estes compostos oferecem propriedades ajustáveis e a capacidade de funcionar como eletrólitos positivos e negativos, tornando-os altamente versáteis e adequados para uma vasta gama de aplicações. Esta área de investigação ainda está no início, pois nenhuma BRCO foi capaz de demonstrar uma *performance* superior para substituir as BRC de vanádio.

No futuro, a comunidade científica deverá estar focada na investigação de novos materiais e dispositivos concebidos para maximizar a eficiência e reciclabilidade das BRC minimizando o seu custo de fabricação.

### Agradecimentos

Este trabalho foi financiado por fundos nacionais da FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, I.P. no âmbito dos projetos (LA/P/0008/2020 DOI: 10.54499/LA/P/0008/2020, UIDP/50006/2020 DOI: 10.54499/UIDP/50006/2020 e UIDB/50006/2020 DOI: 10.54499/UIDB/50006/2020), e do projeto PTDC/QUI-QOR/7450/2020 “Mediadores Redox Orgânicos para a Conversão de Energia”.

### Referências

- [1] D. Gielen, F. Boshell, D. Saygin, M. D. Bazilian, N. Wagner, R. Gorini, *Energy Strateg. Rev.* **2019**, *24*, 38–50. DOI: 10.1016/j.esr.2019.01.006.
- [2] R. M. Elavarasan, R. Pugazhendhi, M. Irfan, L. Mihet-Popa, I. A. Khan, P. E. Campana, *Renew. Sust. Energ. Rev.* **2022**, *159*, 112204. DOI: 10.1016/j.rser.2022.112204.
- [3] UN General Assembly, Transforming our world: the 2030 Agenda for Sustainable Development, A/RES/70/1, 21 October 2015, [refworld.org/legal/resolution/ungva/2015/en/111816](http://refworld.org/legal/resolution/ungva/2015/en/111816) (acedido a 14/04/2024).
- [4] A. R. Dehghani-Sanj, E. Tharumalingam, M. B. Dusseault, R. Fraser, *Renew. Sust. Energ. Rev.* **2019**, *104*, 192–208. DOI: 10.1016/j.rser.2019.01.023.
- [5] A. Sanchez, Q. Zhang, M. Martin, P. Vega, *Energy Conv. Manag.* **2022**, *252*, 115056. DOI: 10.1016/j.enconman.2021.115056.
- [6] A. G. Tamirat, X. Z. Guan, J. Y. Liu, J. Y. Luo, Y. Y. Xia, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, *49*, 7454–7478. DOI: 10.1039/d0cs00489h.
- [7] F. F. Zhang, M. Q. Gao, S. Q. Huang, H. Zhang, X. Wang, L. J. Liu, M. Han, Q. Wang, *Adv. Mater.* **2022**, *34*, 2104562. DOI: 10.1002/adma.202104562.
- [8] W. D. Shao, B. Lu, J. P. Cao, J. N. Zhang, H. R. Cao, F. F. Zhang, C. L. Zhang, *Chem. Asian J.* **2023**, *18*, e202201093. DOI: 10.1002/asia.202201093.
- [9] K. S. Kang, Y. S. Meng, J. Bréger, C. P. Grey, G. Ceder, *Science* **2006**, *311*, 977–980. DOI: 10.1126/science.1122152.
- [10] P. Poizot, F. Dolhem, *Energy Environ. Sci.* **2011**, *4*, 2003–2019. DOI: 10.1039/c0ee00731e.
- [11] M. R. Palacin, *Accounts Mater. Res.* **2021**, *2*, 319–326. DOI: 10.1021/accountsmr.1c00026.
- [12] Z. L. Xu, J. K. Kim, K. Kang, *Nano Today* **2018**, *19*, 84–107. DOI: 10.1016/j.nantod.2018.02.006.
- [13] M. Dhonde, K. Sahu, M. Das, A. Yadav, P. Ghosh, V. V. S. Murty, *J. Electrochem. Soc.* **2022**, *169*, 066507. DOI: 10.1149/1945-7111/ac741f.



- [14] F. Grifoni, M. Bonomo, W. Naim, N. Barbero, T. Alnasser, I. Dzeba, M. Giordano, A. Tsaturyan, M. Urbani, T. Torres, C. Barolo, F. Sauvage, *Adv. Energy Mater.* **2021**, *11*, 2101598. DOI: 10.1002/aenm.202101598.
- [15] K. Wedege, D. Bae, W. A. Smith, A. Mendes, A. Bientien, *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 25729–25740. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b04914.
- [16] A. Ramar, F. M. Wang, R. Foeng, R. C. Hsing, *J. Power Sources* **2023**, *558*, 232611. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2022.232611.
- [17] N. Jordão, H. Cruz, F. Pina, L. C. Branco, *Electrochim. Acta* **2018**, *283*, 718–726. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.04.179.
- [18] G. Kwon, Y. Ko, Y. Kim, K. Kim, K. Kang, *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*, 4423–4433. DOI: 10.1021/acs.accounts.1c00590.
- [19] C. M. Davis, C. E. Boronski, T. Y. Yang, T. Liu, Z. M. Liang, *Batteries-Basel* **2023**, *9*, 504. DOI: 10.3390/batteries9100504.
- [20] Z. Y. Zhang, T. Ding, Q. Zhou, Y. G. Sun, M. Qu, Z. Y. Zeng, Y. T. Ju, L. Li, K. Wang, F. D. Chi, *Renew. Sust. Energ. Rev.* **2021**, *148*, 111263. DOI: 10.1016/j.rser.2021.111263.
- [21] J. B. Gerken, C. W. Anson, Y. Preger, P. G. Symons, J. D. Genders, Y. Qiu, W. Z. Li, T. W. Root, S. S. Stahl, *Adv. Energy Mater.* **2020**, *10*, 2000340. DOI: 10.1002/aenm.202000340.
- [22] Y. Preger, M. R. Johnson, S. Biswas, C. W. Anson, T. W. Root, S. S. Stahl, *ACS Energy Lett.* **2020**, *5*, 1407–1412. DOI: 10.1021/acsenergylett.0c00631.
- [23] H. S. Kim, J. H. Ryu, S. M. Oh, *J. Electrochem. Soc.* **2020**, *167*, 160526. DOI: 10.1149/1945-7111/abc5f4.
- [24] A. A. Vereshchagin, A. Y. Kalinin, A. I. Volkov, D. A. Lukyanov, O. V. Levin, *Energies* **2022**, *15*, 2699. DOI: 10.3390/en15072699.
- [25] X. W. Yu, W. A. Yu, A. Manthiram, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, *12*, 48654–48661. DOI: 10.1021/acsami.0c14736.
- [26] D. H. Xu, C. J. Zhang, Y. H. Zhen, Y. C. Zhao, Y. D. Li, *J. Power Sources* **2021**, *495*, 229819. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2021.229819.
- [27] J. S. Yuan, C. J. Zhang, Y. H. Zhen, Y. C. Zhao, Y. D. Li, *J. Power Sources* **2019**, *443*, 227283. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2019.227283.
- [28] J. A. Luo, B. Hu, M. W. Hu, Y. Zhao, T. L. Liu, *ACS Energy Lett.* **2019**, *4*, 2220–2240. DOI: 10.1021/acsenergylett.9b01332.
- [29] M. Y. Zhou, Y. Chen, M. Salla, H. Zhang, X. Wang, S. R. Mothe, Q. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 14286–14291. DOI: 10.1002/anie.202004603.
- [30] K. Wedege, E. Drazevic, D. Konya, A. Bientien, *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 39101. DOI: 10.1038/srep39101.
- [31] B. Huskinson, M. P. Marshak, C. Suh, S. Er, M. R. Gerhardt, C. J. Galvin, X. D. Chen, A. Aspuru-Guzik, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *Nature* **2014**, *505*, 195–198. DOI: 10.1038/nature12909.
- [32] Y. Xu, Y. Wen, J. Cheng, Y. Yang, Z. Xie, G. Cao, “Novel organic redox flow batteries using soluble quinonoid compounds as positive materials,” 2009 World Non-Grid-Connected Wind Power and Energy Conference, Nanjing, China, **2009**, 1–4. DOI: 10.1109/WNWE.2009.5335870.
- [33] B. Hu, C. DeBruler, Z. Rhodes, T. L. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 1207–1214. DOI: 10.1021/jacs.6b10984.
- [34] M. Mansha, A. Anam, S. A. Khan, A. S. Alzahrani, M. Khan, A. Ahmad, M. Arshad, S. Ali, *Chem. Rec.* **2024**, *24*, e202300233. DOI: 10.1002/tcr.202300233.
- [35] M. Mansha, A. Ayub, I. A. Khan, S. Ali, A. S. Alzahrani, M. Khan, M. Arshad, A. Rauf, S. A. Khan, *Chem. Rec.* **2024**, *24*, e202300284. DOI: 10.1002/tcr.202300284.
- [36] Q. R. Chen, Y. G. Lv, Z. Z. Yuan, X. F. Li, G. H. Yu, Z. J. Yang, T. W. Xu, *Adv. Funct. Mater.* **2022**, *32*, 2108777. DOI: 10.1002/adfm.202108777.
- [37] J. Rubio-García, A. Kucernak, A. Parra-Puerto, R. T. Liu, B. Chakrabarti, *J. Mater. Chem. A* **2020**, *8*, 3933–3941. DOI: 10.1039/c9ta12396b.
- [38] Y. Ding, G. H. Yu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 4772–4776. DOI: 10.1002/anie.201600705.
- [39] F. Hasan, V. Mahanta, A. A. Abdelazeez, *Adv. Mater. Interfaces* **2023**, *10*, 2300268. DOI: 10.1002/admi.202300268.
- [40] M. Rafiee, D. Nematollahi, *Electroanalysis* **2007**, *19*, 1382–1386. DOI: 10.1002/elan.200703864.
- [41] D. T. Scott, D. M. McKnight, E. L. Blunt-Harris, S. E. Kolesar, D. R. Lovley, *Environ. Sci. Technol.* **1998**, *32*, 2984–2989. DOI: 10.1021/es980272q.
- [42] L. C. Topp, M. A. Goulet, D. P. Tabor, E. F. Kerr, D. De Porcellinis, E. M. Fell, A. Aspuru-Guzik, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *ACS Energy Lett.* **2019**, *4*, 1880–1887. DOI: 10.1021/acsenergylett.9b01321.
- [43] B. Yang, L. Hooper-Burkhardt, F. Wang, G. K. S. Prakash, S. R. Narayanan, *J. Electrochem. Soc.* **2014**, *161*, A1371–A1380. DOI: 10.1149/2.1001409jes.
- [44] K. X. Lin, Q. Chen, M. R. Gerhardt, L. C. Tong, S. B. Kim, L. Eisenach, A. W. Valle, D. Hardee, R. G. Gordon, M. J. Aziz, M. P. Marshak, *Science* **2015**, *349*, 1529–1532. DOI: 10.1126/science.1263033.
- [45] M. R. Gerhardt, L. C. Tong, R. Gomez-Bombarelli, Q. Chen, M. P. Marshak, C. J. Galvin, A. Aspuru-Guzik, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *Adv. Energy Mater.* **2017**, *7*, 1601488. DOI: 10.1002/aenm.201601488.
- [46] S. Zhang, X. Li, D. D. Chu, *Electrochim. Acta* **2016**, *190*, 737–743. DOI: 10.1016/j.electacta.2015.12.139.
- [47] J. Carretero-Gonzalez, E. Castillo-Martinez, M. Armand, *Energy Environ. Sci.* **2016**, *9*, 3521–3530. DOI: 10.1039/c6ee01883a.
- [48] Y. Ding, Y. F. Li, G. H. Yu, *Chem* **2016**, *1*, 790–801. DOI: 10.1016/j.chempr.2016.09.004.
- [49] B. Yang, L. Hooper-Burkhardt, S. Krishnamoorthy, A. Murali, G. K. S. Prakash, S. R. Narayanan, *J. Electrochem. Soc.* **2016**, *163*, A1442–A1449. DOI: 10.1149/2.1371607jes.
- [50] R. B. Jethwa, E. W. Zhao, R. N. Kerber, E. Jonsson, D. S. Wright, C. P. Grey, *J. Mater. Chem. A* **2021**, *9*, 15188–15198. DOI: 10.1039/d1ta02870g.
- [51] S. I. Etkind, J. Lopez, Y. G. Zhu, J. H. Fang, W. J. Ong, Y. Shao-Horn, T. M. Swager, *ACS Sustain. Chem. Eng.* **2022**, *10*, 11739–11750. DOI: 10.1021/acssuschemeng.2c01717.
- [52] J. D. Hofmann, S. Schmalisch, S. Schwan, L. C. Hong, H. A. Wegner, D. Mollenhauer, J. Janek, D. Schroder, *Chem. Mat.* **2020**, *32*, 3427–3438. DOI: 10.1021/acs.chemmater.9b05077.
- [53] X. Yang, S. N. Garcia, T. Janoschka, D. Konya, M. D. Hager, U. S. Schubert, *Molecules* **2021**, *26*, 3823. DOI: 10.3390/molecules26133823.
- [54] Y. Xu, Y. T. Zheng, C. C. Wang, Q. Chen, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2019**, *11*, 23222–23228. DOI: 10.1021/acsami.9b05159.
- [55] S. J. Jin, Y. Jing, D. G. Kwabi, Y. L. Ji, L. C. Tong, D. De Porcellinis, M. A. Goulet, D. A. Pollack, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *ACS Energy Lett.* **2019**, *4*, 1342–1348. DOI: 10.1021/acsenergylett.9b00739.
- [56] C. Wiberg, T. J. Carney, F. Brushett, E. Ahlberg, E. G. Wang, *Electrochim. Acta* **2019**, *317*, 478–485. DOI: 10.1016/j.electacta.2019.05.134.
- [57] M. A. Goulet, L. C. Tong, D. A. Pollack, D. P. Tabor, S. A. Odom, A. Aspuru-Guzik, E. E. Kwan, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 8014–8019. DOI: 10.1021/jacs.8b13295.
- [58] K. Peng, Y. Y. Li, G. G. Tang, Y. H. Liu, Z. J. Yang, T. W. Xu, *Energy Environ. Sci.* **2023**, *16*, 430–437. DOI: 10.1039/d2ee03617g.
- [59] Y. L. Ji, M. A. Goulet, D. A. Pollack, D. G. Kwabi, S. Y. Jin, D. De Porcellinis, E. F. Kerr, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *Adv. Energy Mater.* **2019**, *9*, 1900039. DOI: 10.1002/aenm.201900039.
- [60] S. Nandi, L. E. de Sousa, T. Vegge, P. de Silva, *Batteries Supercaps* **2023**, *6*, e202200443. DOI: 10.1002/batt.202200443.
- [61] K. Amini, E. F. Kerr, T. Y. George, A. M. Alfaraidi, Y. Jing, T. Tsukamoto, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *Adv. Funct. Mater.* **2023**, *33*, 2211338. DOI: 10.1002/adfm.202211338.
- [62] S. Bauer, J. C. Namyslo, D. E. Kaufmann, T. Turek, *J. Electrochem. Soc.* **2020**, *167*, 110522. DOI: 10.1149/1945-7111/aba338.
- [63] J. T. Mao, W. Q. Ruan, Q. Chen, *J. Electrochem. Soc.* **2020**, *167*, 070522. DOI: 10.1149/1945-7111/ab7550.
- [64] Y. Jing, E. M. Fell, M. Wu, S. J. Jin, Y. L. Ji, D. A. Pollack, Z. J. Tang, D. A. Ding, M. Bahari, M. A. Goulet, T. Tsukamoto, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*, 226–235. DOI: 10.1021/acsenergylett.1c02504.
- [65] M. Wu, M. Bahari, Y. Jing, K. Amini, E. M. Fell, T. Y. George, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *Batteries Supercaps* **2022**, *5*, e202200009. DOI: 10.1002/batt.202200009.
- [66] L. C. Tong, Y. Jing, R. G. Gordon, M. J. Aziz, *ACS Appl. Energy Mater.* **2019**, *2*, 4016–4021. DOI: 10.1021/acsaem.9b00691.
- [67] S. Guiheneuf, A. Le, T. Godet-Bar, L. Chancelier, J. M. Fontmorin, D. Floner, F. Geneste, *ChemElectroChem* **2021**, *8*, 2526–2533. DOI: 10.1002/celc.202100284.
- [68] A. R. F. Lima, R. C. Pereira, J. Azevedo, A. Mendes, J. S. S. De Melo, *J. Mol. Liq.* **2021**, *336*, 116364. DOI: 10.1016/j.jmolliq.2021.116364.
- [69] D. Pinheiro, J. F. M. Sousa, M. Pineiro, A. J. M. Valente, J. S. S. De Melo, *J. Energy Storage* **2023**, *57*, 106201. DOI: 10.1016/j.est.2022.106201.
- [70] M. Pahlevaninezhad, P. Leung, P. Q. Velasco, M. Pahlevani, F. C. Walsh, E. P. L. Roberts, C. P. de Leon, *J. Power Sources* **2021**, *500*, 229942. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2021.229942.
- [71] S. Néron, M. Morency, L. G. Chen, T. Maris, D. Rochefort, R. Iftimie, J. D. Wuest, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 7673–7695. DOI: 10.1021/acs.joc.2c00260.
- [72] T. T. Wu, G. L. Dai, J. J. Xu, F. Cao, X. H. Zhang, Y. Zhao, Y. M. Qian, *Rare Metals* **2023**, *42*, 3269–3303. DOI: 10.1007/s12598-023-02358-1.
- [73] R. P. Fornari, P. de Silva, *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2021**, *11*, e1495. DOI: 10.1002/wcms.1495.
- [74] D. P. Tabor, R. Gomez-Bombarelli, L. C. Tong, R. G. Gordon, M. J. Aziz, A. Aspuru-Guzik, *J. Mater. Chem. A* **2019**, *7*, 12833–12841. DOI: 10.1039/c9ta03219c.
- [75] S. Nandi, L. E. de Sousa, T. Vegge, P. de Silva, *Batteries Supercaps* **2023**, *6*, e202200443. DOI: 10.1002/batt.202200443.
- [76] Z. H. Niu, H. X. Wu, Y. H. Lu, S. Y. Xiong, X. Zhu, Y. Zhao, X. H. Zhang, *RSC Adv.* **2019**, *9*, 5164–5173. DOI: 10.1039/c8ra09377f.
- [77] Q. Zhang, A. Khetan, E. Sorkun, F. Niu, A. Loss, I. Pucher, S. Er, *Energy Storage Mater.* **2022**, *47*, 167–177. DOI: 10.1016/j.ensm.2022.02.013.
- [78] A. Khetan, *Batteries* **2023**, *9*, 24. DOI: 10.3390/batteries9010024.
- [79] I. Baskin, Y. Ein-Eli, *Adv. Energy Mater.* **2022**, *12*, 2202380. DOI: 10.1002/aenm.202202380.
- [80] A. Hashemi, R. Khakpour, A. Mahdian, M. Busch, P. Peljo, K. Laasonen, *Digit. Discov.* **2023**, *2*, 1565–1576. DOI: 10.1039/d3dd00091e.
- [81] F. Wang, J. P. Li, Z. Liu, T. Qiu, J. Z. Wu, D. X. Lu, *Front. Chem. Eng.* **2023**, *4*, 1086412. DOI: 10.3389/fceng.2022.1086412.

&gt;

**Flávia Leitão**

Faculdade de Ciências e Tecnologia – NOVA FCT.

Licenciada e Mestre pela Faculdade de Ciências e Tecnologia – NOVA FCT. Foi bolsista no projeto ORGENCON – “Mediadores Redox Orgânicos Para Conversão de Energia” – PTDC/QUI-QOR/7450/2020. É atualmente estudante de doutoramento em Química em ambiente Não Académico entre a NOVA FCT e a Sea4us sob a orientação dos Professores Paula S. Branco, Luísa M. Ferreira e Doutor André Bastos (Sea4us). O projeto de doutoramento insere-se na síntese de pequenas moléculas orgânicas para atuar na dor crónica e aguda.

fl.leitao@campus.fct.unl.pt

ORCID.org/0000-0003-3160-9567

&gt;

**Hugo Cruz**

INL – International Iberian Nanotechnology Laboratory.

Hugo Cruz é investigador *staff* no INL – International Iberian Nanotechnology Laboratory. Previamente foi investigador júnior na NOVA FCT. A atividade científica tem-se centrado no desenho e desenvolvimento de materiais e eletrólitos orientada para diversas aplicações energéticas. Os interesses científicos têm-se diversificado em várias áreas tendo sempre por base o *design* e a preparação de solventes e géis, eletrólitos e materiais alternativos, que podem contribuir para soluções interdisciplinares, nomeadamente eletrólitos para dispositivos electrocrómicos ECDs e fotocrómicos, células solares DSSCs, baterias e supercondensadores, bem como solventes para síntese de compostos químicos através de eletrossíntese.

Hugo.cruz@unl.int

hg.cruz@fct.unl.pt

ORCID.org/0000-0002-1047-7342

&gt;

**\*Luís C. Branco**

Faculdade de Ciências e Tecnologia – NOVA FCT.

Luis C. Branco é Professor Associado na NOVA FCT. Os seus interesses de investigação centram-se principalmente no desenvolvimento de processos químicos sustentáveis e materiais funcionais aplicados, incluindo líquidos iónicos e sistemas eutéticos. Tem sido possível explorar aplicações nas áreas da catálise sustentável (processos de valorização de CO<sub>2</sub>), energias limpas renováveis (armazenamento de energia) e medicina personalizada (novas formulações iónicas com atividade terapêutica).

l.branco@fct.unl.pt

ORCID.org/0000-0003-2520-1151

&gt;

**\*Paula S. Branco**

Faculdade de Ciências e Tecnologia – NOVA FCT.

Paula Sérgio Branco é Professora Associada com Agregação na NOVA FCT. A atividade científica tem-se desenvolvido na química orgânica de síntese orientada por objetivos, sendo que os interesses científicos se têm diversificado em várias áreas tendo sempre por base o *design* e a síntese de novas moléculas e novas reações, que podem contribuir para soluções interdisciplinares, nomeadamente corantes para DSSCs, ou a síntese de produtos naturais e derivados com potencial interesse biológico.

paula.branco@fct.unl.pt

ORCID.org/0000-0002-7312-8596

# Estruturas Metal- -orgânicas como Eletrocatalisadores para a Redução de CO<sub>2</sub>

>  
Duarte Borralho\*<sup>1</sup>  
Mariana Ferreira\*<sup>1</sup>  
Sara Realista  
Paulo N. Martinho

**Metal-Organic Frameworks as Electrocatalysts for CO<sub>2</sub> Reduction.** Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) is one of the main gases responsible for increasing the anthropogenic greenhouse effect in the Earth's atmosphere. The electrocatalytic conversion of CO<sub>2</sub> can be a promising way to convert this gas into useful compounds such as hydrocarbons and alcohols. However, since the energy necessary for the conversion of CO<sub>2</sub> is significantly high, it is considered an inert molecule (with low reactivity). Therefore, the choice of catalyst is an important factor to reduce this energy barrier and add selectivity towards a product. Metal-organic frameworks (MOFs) are excellent candidates to work as catalysts since they possess favourable properties for this process, such as high permanent porosity, high crystallinity, high surface area, and their open metal sites availability. To be used as electrocatalysts, they must be immobilised on a conductive surface. This paper will focus on the MOFs used, types of immobilisation, and results for the electrocatalysis of CO<sub>2</sub>.

O dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) é um dos principais gases responsáveis pelo aumento antropogénico do efeito de estufa na atmosfera da Terra. A conversão eletrocatalítica do CO<sub>2</sub> pode ser uma medida promissora que permite converter este gás em moléculas úteis – hidrocarbonetos e álcoois. Contudo, uma vez que CO<sub>2</sub> é uma molécula inerte, isto é, pouco reativa, a energia necessária para a sua conversão é alta. Assim, a escolha do catalisador é um fator importante para a redução desta energia, permitindo ainda aumentar a seletividade para um produto desejado. As estruturas metal-orgânicas (do inglês MOFs) são excelentes candidatas, visto que possuem propriedades favoráveis para este processo – elevada porosidade permanente, elevada cristalinidade, elevada área superficial e a disponibilidade de centros metálicos ativos. Para serem utilizadas como eletrocatalisadores é necessária a sua imobilização numa superfície condutora. Este artigo discutirá as MOFs usadas, as diferentes técnicas para a sua imobilização e os resultados obtidos na conversão eletrocatalítica do CO<sub>2</sub>.

## O dióxido de carbono e o efeito de estufa

Ao longo dos últimos anos, um tema que tem sido uma grande causa de preocupação e que influencia todos os seres vivos no nosso planeta são as alterações climáticas, nomeadamente o aquecimento global causado pelo efeito de estufa acentuado pela ação humana. Este efeito é definido como o aprisionamento de calor na atmosfera da Terra, por meio de certas substâncias denominadas gases de efeito de estufa (como o vapor de água, o dióxido de carbono, o óxido nítrico, o metano e clorofluorcarbonetos). Estes gases absorvem e reemitem (sob forma de calor) parte da radiação infravermelha emitida pelo sol que incide na superfície da Terra e que é refletida, atuando como paredes isoladoras de uma estufa, tal como o nome sugere (Figura 1) [1].

Figura 1 – O efeito de estufa.



Estas substâncias conseguem absorver a radiação infravermelha proveniente do sol devido à estrutura molecular que possuem, pois ao serem constituídas por três ou mais átomos, conseguem absorver radiações na gama do infravermelho em pelo menos um dos seus modos vibracionais [2].

É importante mencionar, no entanto, que este efeito ocorre naturalmente e permite que a Terra possua uma temperatura média apropriada à vida (aprox. 20 °C) [3]. Caso não existisse o efeito estufa, o calor que outrora seria absorvido pelos gases de estufa, seria libertado para o espaço e a temperatura média da Terra diminuiria drasticamente (a -20 °C), congelando vários ecossistemas [1]. Contudo, desde a Revolução Industrial nos séculos XVIII e XIX, os gases causadores do efeito de estufa têm sido libertados em excesso para a atmosfera, maioritariamente devido à queima de combustíveis fósseis, capturando cada vez mais radiação infravermelha proveniente do sol e, por consequência, aumentando a temperatura média da superfície da Terra. Este grande problema é conhecido por aquecimento global [4].

O dióxido de carbono, ou CO<sub>2</sub>, é um dos gases que mais contribui para este efeito de estufa sendo, por esta razão, necessário criar formas de limitar a sua emissão para a atmosfera [3]. Uma das soluções para este problema, que está a ser estudado atualmente pela comunidade científica, é a conversão do CO<sub>2</sub> em diversos produtos úteis através de meios eletroquímicos [5].

### Redução eletroquímica do CO<sub>2</sub>

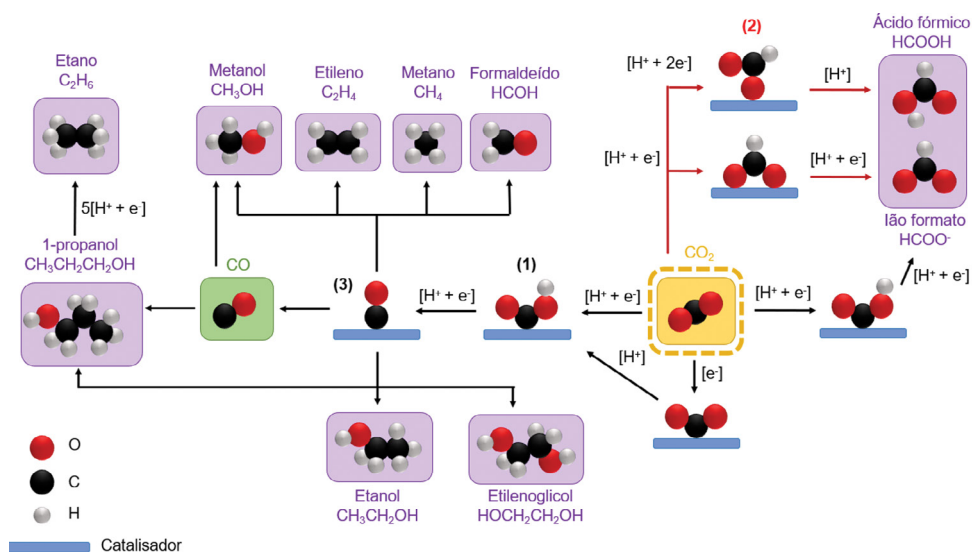
Um dos métodos de conversão do CO<sub>2</sub> é a reação de redução eletroquímica do CO<sub>2</sub> (do inglês eCO<sub>2</sub>RR), que é bastante promissora uma vez que permite converter o CO<sub>2</sub> em produtos químicos úteis à sociedade tais como hidrocarbonetos e álcoois, para diversas aplicações, por exemplo precursores industriais, a

condições atmosféricas [6]. Contudo, em geral, esta molécula é inerte e estável, tornando a sua energia de ativação elevada, isto é, a energia necessária para converter o CO<sub>2</sub>. De modo a contornar este problema, são utilizados catalisadores, que procuram diminuir essa mesma energia, e ao mesmo tempo aumentar a quantidade de produtos formados, tornando o processo de conversão mais eficiente [7].

O CO<sub>2</sub> pode ligar-se de diferentes formas ao catalisador, seja pelos átomos de oxigénio ou pelo átomo de carbono e pensa-se que isto irá determinar o tipo de produtos obtidos. Como se pode observar na Figura 2, estima-se que o CO<sub>2</sub> pode ligar-se ao catalisador pelos átomos de oxigénio (esferas a vermelho), onde o produto maioritário é o ácido fórmico/ião formato (HCOOH/HCOO<sup>-</sup>), ou pode ligar-se ao catalisador pelo átomo de carbono (esferas a preto), produzindo maioritariamente monóxido de carbono (CO), que, por sua vez, poderá ser reduzido a hidrocarbonetos e álcoois. Desta forma, o passo determinante na eCO<sub>2</sub>RR é a primeira transferência eletrónica [6].

Um dos desafios deste tipo de reações é garantir seletividade. Como se pode observar na Tabela 1, uma das reações que existe em competição com a eCO<sub>2</sub>RR é a reação de evolução de hidrogénio: por um lado são necessários prótons para originar diversos hidrocarbonetos e produtos oxigenados, por outro lado esses mesmos prótons podem formar hidrogénio (H<sub>2</sub>), diminuindo a seletividade para a obtenção dos produtos de carbono desejados [5]. Desta forma, torna-se crucial o desenho de catalisadores não apenas eficientes, com alta atividade e durabilidade, mas também seletivos. No caso da eCO<sub>2</sub>RR, catalisadores cuja composição e estrutura favorecem a adsorção dos intermediários -COOH (1) ou -OCO (2) conforme apresentado na Figura 2, irão formar maioritariamente CO e ácido fórmico/ião formato, respetivamente [5]. Posto isto,

Figura 2 – Os diversos produtos da eCO<sub>2</sub>RR e os respetivos caminhos possíveis.



uma das propriedades mais decisivas na determinação da seletividade da eCO<sub>2</sub>RR é a energia de ligação relativa dos intermediários (1, 2, 3 e -H) à superfície do catalisador (normalmente a um centro metálico) onde, em geral: estruturas com centros metálicos como gálio, índio, estanho e bismuto favorecem a adsorção do intermediário 2 promovendo a formação do ião formato, ao passo que centros metálicos como zinco, prata, ouro e paládio favorecem a adsorção do intermediário 1 (promovendo a formação de CO) [6]. Estruturas que possuam cobre como centro metálico estabilizam ambos os intermediários 1 e 3, tornando possível a formação de hidrocarbonetos e álcoois [5].

A eCO<sub>2</sub>RR pode ser realizada em sistemas homogêneos (uso de mediadores redox) ou heterogêneos (catalisador imobilizado no eletrodo). Uma grande vantagem dos sistemas heterogêneos é o facto dos catalisadores estarem normalmente na fase sólida e os reagentes (e produtos) na fase gasosa ou líquida, tornando possível a fácil recuperação e reutilização do catalisador após o processo [9,10]. Assim sendo, este trabalho irá focar-se numa classe nova de materiais como electrocatalisadores (últimas décadas) – as estruturas metalo-orgânicas, conhecidas por MOFs (do inglês *Metal-Organic Frameworks*).

### MOFs como electrocatalisadores

Como catalisadores para este tipo de reações, as MOFs ou PCPs (do inglês *Porous Coordination Polymers*) são materiais interessantes. Estas estruturas são constituídas, como o nome indica, por uma componente inorgânica e outra orgânica cuja estrutura é originada a partir da automontagem, isto é, formação,

organização e crescimento da estrutura a partir das interações entre os precursores sem intervenção do operador, onde a estrutura é mantida através das interações por ligação de coordenação do ligando orgânico rígido ao centro metálico (Figura 3) [11]. Estes materiais apresentam diversas propriedades que os tornam excelentes candidatos para catálise – alta área superficial (até 7000 m<sup>2</sup>/g) devido à sua elevada e permanente porosidade (cerca de 90% do seu volume livre), a sua alta cristalinidade originada pelo uso de ligações direcionadas entre os componentes utilizados, e ainda a sua disponibilidade de centros metálicos ativos, devido a encontrarem-se não saturados [12,13]. Outra propriedade importante destes compostos é a sua versatilidade, que resulta da grande variedade de precursores disponíveis. Teoricamente, é possível utilizar qualquer centro metálico e qualquer ligando orgânico com estrutura rígida e capacidade de coordenação a metais. Esta flexibilidade permite criar estruturas com diferentes topologias, áreas superficiais, tamanhos e formas de poros. Além disso, os grupos funcionais presentes na estrutura e os centros metálicos ativos podem ser ajustados dependendo da aplicação e substrato/produto desejado. [12,13].

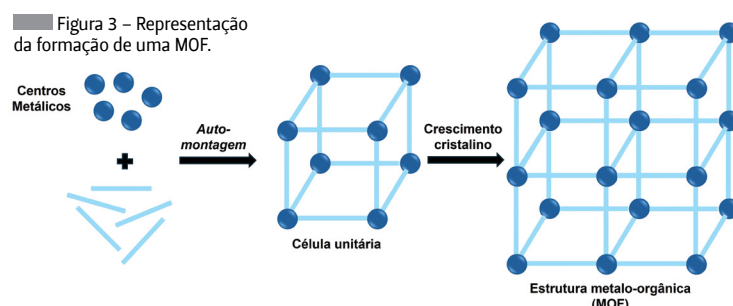


Tabela 1 – A reação de evolução de hidrogénio (HER) e as semirreações da eCO<sub>2</sub>RR com os respetivos potenciais padrão de redução (E<sup>0</sup>) versus eletrodo de hidrogénio reversível (RHE). Adaptado de [8].

| Produtos   | Meio  |                            |   |                            |
|--|---|----------------------------|---|----------------------------|
|  | Básico  | E <sup>0</sup> (V) vs. RHE | Ácido   | E <sup>0</sup> (V) vs. RHE |
| H <sub>2</sub>                                     | 2H <sub>2</sub> O + 2e <sup>-</sup> → H <sub>2</sub> + 2OH <sup>-</sup>   | -0,828                     | 2H <sup>+</sup> + 2e <sup>-</sup> → H <sub>2</sub>  | 0,000                      |
| CO   | CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> O + 2e <sup>-</sup> → CO + 2OH <sup>-</sup>  | -0,932                     | CO <sub>2</sub> + 2H <sup>+</sup> + 2e <sup>-</sup> → CO + H <sub>2</sub> O   | -0,104                     |
| HCOOH  | CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> O + 2e <sup>-</sup> → HCOO <sup>-</sup> + OH <sup>-</sup>  | -0,639                     | CO <sub>2</sub> + 2H <sup>+</sup> + 2e <sup>-</sup> → HCOOH   | -0,171                     |
| CH <sub>3</sub> OH                                 | CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O + 6e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> OH + 6OH <sup>-</sup>                                     | -0,812                     | CO <sub>2</sub> + 6H <sup>+</sup> + 6e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> OH + H <sub>2</sub> O                                     | 0,016                      |
| CH <sub>3</sub> COOH                               | 2CO <sub>2</sub> + 5H <sub>2</sub> O + 8e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup> + 7OH <sup>-</sup>                      | -0,653                     | 2CO <sub>2</sub> + 8H <sup>+</sup> + 8e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> COOH + 2H <sub>2</sub> O                                 | 0,098                      |
| CH <sub>4</sub>                                    | CO <sub>2</sub> + 6H <sub>2</sub> O + 8e <sup>-</sup> → CH <sub>4</sub> + 8OH <sup>-</sup>  | -0,659                     | CO <sub>2</sub> + 8H <sup>+</sup> + 8e <sup>-</sup> → CH <sub>4</sub> + 2H <sub>2</sub> O                                       | 0,169                      |
| CH <sub>3</sub> CHO                                | 2CO <sub>2</sub> + 7H <sub>2</sub> O + 10e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> CHO + 10OH <sup>-</sup>                                 | -0,775                     | 2CO <sub>2</sub> + 10H <sup>+</sup> + 10e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> CHO + 3H <sub>2</sub> O                                | 0,053                      |
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>                      | 2CO <sub>2</sub> + 8H <sub>2</sub> O + 12e <sup>-</sup> → C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> + 12OH <sup>-</sup>                       | -0,743                     | 2CO <sub>2</sub> + 12H <sup>+</sup> + 12e <sup>-</sup> → C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> + 4H <sub>2</sub> O                      | 0,085                      |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH                 | 2CO <sub>2</sub> + 9H <sub>2</sub> O + 12e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH + 12OH <sup>-</sup>                  | -0,744                     | 2CO <sub>2</sub> + 12H <sup>+</sup> + 12e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH + 3H <sub>2</sub> O                 | 0,084                      |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>                      | 2CO <sub>2</sub> + 10H <sub>2</sub> O + 14e <sup>-</sup> → C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + 14OH <sup>-</sup>                      | -0,685                     | 2CO <sub>2</sub> + 14H <sup>+</sup> + 14e <sup>-</sup> → C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + 4H <sub>2</sub> O                      | 0,144                      |
| CH <sub>3</sub> COCH <sub>3</sub>                  | 3CO <sub>2</sub> + 11H <sub>2</sub> O + 16e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> COCH <sub>3</sub> + 16OH <sup>-</sup>                  | -0,726                     | 3CO <sub>2</sub> + 16H <sup>+</sup> + 16e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> COCH <sub>3</sub> + 5H <sub>2</sub> O                  | 0,102                      |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH | 3CO <sub>2</sub> + 13H <sub>2</sub> O + 18e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH + 18OH <sup>-</sup> | -0,733                     | 3CO <sub>2</sub> + 18H <sup>+</sup> + 18e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH + 5H <sub>2</sub> O | 0,095                      |

Para o uso das MOFs como eletrocatalisadores, é necessária a sua imobilização numa superfície condutora, originando revestimentos, uma vez que as MOFs são tradicionalmente formadas a partir de métodos solvotérmicos ou hidrotérmicos (a reação ocorre selada a temperaturas e pressões elevadas em meio orgânico ou aquoso, respetivamente), dando origem à estrutura na forma de pó, cuja insolubilidade impede o seu uso em catálise homogénea. No entanto, em geral, para aplicações eletrocatalíticas, as MOFs na sua forma tradicional, sofrem alguns problemas relacionados com a sua baixa condutividade e falta de estabilidade no meio eletroquímico, levando isto ao desenvolvimento de técnicas, quer seja pré ou pós-síntese, que modificam a estrutura a partir da alteração e controlo do meio reacional, incorporação de espécies adicionais, origem de falhas, ou ainda a utilização de ligandos previamente funcionalizados, permitindo a alteração das propriedades destes materiais [14,15].

Existem ainda diversas técnicas de imobilização que permitem atribuir propriedades diferentes aos revestimentos formados por estas estruturas devido à diferença do seu crescimento entre os métodos de formação dos revestimentos.

### Formação de revestimentos de MOFs

As técnicas de formação de revestimentos são baseadas na formação direta da estrutura da MOF a partir dos precursores na respetiva superfície ou a partir da imobilização da MOF na forma de pó pós-síntese. Algumas das técnicas mais comuns são: imersão da superfície durante o processo solvotérmico, deposição camada a camada e deposição de camada atómica, revestimento por imersão, deposição por gota, evaporação das partículas condensando-as na superfície, deposição eletroquímica, deposição química ou física em fase de vapor, evaporação lenta do solvente, entre outros. Alguns destes métodos podem ainda ser divididos em especificações adicionais, como no caso da deposição eletroquímica poder ser dividida em deposição catódica, anódica, eletroforética, ou

ainda em deslocamento galvânico. No entanto, todos estes métodos apresentam vantagens e problemas, como por exemplo nos casos dos métodos de deposição camada a camada e revestimento por imersão, estes serem simples e facilmente reproduzidos, mas necessitarem de grandes quantidades de solvente e serem limitados no controlo do crescimento da estrutura na superfície. O grande desafio é encontrar e otimizar um método geral que permita a formação rápida, acessível, controlada e com possibilidade de escalonamento destes revestimentos de MOFs [16-18].

Na Tabela 2, estão reportadas as MOFs e o tipo de imobilização das mesmas para serem usadas como eletrocatalisadores na conversão de  $\text{CO}_2$ . Os tipos de imobilização usados são deposição eletroforética, deposição por gota, deposição catódica e revestimento por imersão (Figura 4). A deposição eletroforética consiste na aplicação de uma diferença de potencial, originando um campo elétrico que leva à migração das partículas da MOF pós-síntese (em forma de pó) para o respetivo eletrodo baseado na sua carga [19]. No caso da deposição catódica, o revestimento é produzido a partir da formação de uma solução contendo os precursores da MOF (M e L) e uma Probase (PB) e da aplicação de um potencial redutivo, a PB é reduzida a base (B) e esta, por sua vez, irá desprotonar o ligando (L), permitindo a reação entre os precursores, formando a MOF diretamente na superfície do substrato [20]. O método de deposição por gota consiste em utilizar uma suspensão contendo a MOF pós-síntese que é gotejada no substrato, onde, posteriormente, o solvente é evaporado [21]. E por fim, o método de revestimento por imersão onde o substrato é submerso numa suspensão contendo a MOF e retirado posteriormente. O tempo e a velocidade deste processo são variáveis definidas [22].

### Conversão do $\text{CO}_2$

A Tabela 2 contém várias MOFs utilizadas na eletrorredução de  $\text{CO}_2$  e os produtos de interesse que as mesmas formam, bem como a eficiência farádica

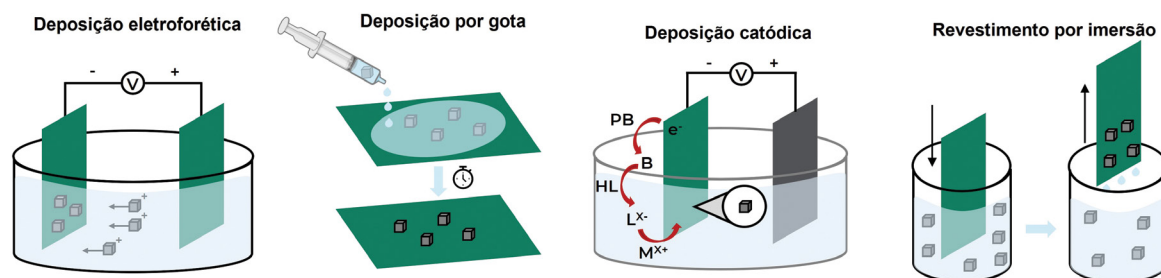


Figura 4 – Esquema de alguns dos métodos utilizados para a imobilização de MOFs utilizadas na eletrorredução de  $\text{CO}_2$ .

Partículas da MOF  
 Substrato (superfície condutora onde irá ser imobilizada a MOF)  
 PB - Probase  
 B - Base  
 L - Ligando  
 M - Metal

que é definida como a razão entre a quantidade de carga experimental que conduz ao produto desejado e a quantidade total de carga que passa através da célula eletroquímica [23], sendo que desta forma se mede o quão eficazmente a carga elétrica é utilizada no processo eletroquímico. É de notar que, como reação de competição, a produção de  $H_2$  dá-se em todos estes exemplos, embora em pequenas quantidades na maior parte dos casos.

As MOFs apresentadas na Tabela 2 são alguns dos avanços mais seletivos que a comunidade científica conseguiu produzir sobre este tema, sendo que estes

catalisadores mostram altas eficiências farádicas na sua aplicação para a produção do produto desejado. No entanto, para além dos apresentados na tabela, existem alguns avanços onde os autores conseguiram sintetizar e formar revestimentos destes materiais onde apesar da seletividade ser consideravelmente menor, apresentam uma maior produção de múltiplos produtos onde a sua seletividade consegue ser controlada a partir da modificação das condições do processo. Por exemplo, Chen e colaboradores [45] sintetizaram variações da MOF Cu-BDC onde adicionaram grupos funcionais ( $-NH_2$ ,  $-OH$ ,  $-F$ ) à estrutura da MOF. Estes catalisadores

Tabela 2 – MOFs utilizadas para a eletrorredução de  $CO_2$ , bem como as condições da imobilização e catálise. O elétrodo de referência mencionado é: RHE – Elétrodo de Hidrogénio Reversível. FTO – *Fluorine-doped Tin Oxide*.

| MOF  | Imobilização                             | Substrato                   | Potencial (V vs. RHE)                  | Eletrólito                    | Eficiência Farádica (%) (Produto) | Ref.      |
|--|--|-----------------------------|--|-------------------------------|-----------------------------------|-----------|
| $Al_2(OH)_2TCPP-Co$                                  | Deposição de camada atômica + microondas | Disco de carbono/FTO        | -0,7                                   | $K_2CO_3$                     | 76 (CO)                           | [24]      |
| Fe-MOF-525   | Deposição eletroforética                 | FTO                         | -0,9                                   | TBAPF <sub>6</sub> /DMF       | 40 (CO)                           | [25]      |
| ZIF-8  | Deposição por gota                       | Papel de carbono            | -1,1                                   | $K_2SO_4$                     | 81 (CO)                           | [26]      |
| ZIF-8-5%   |  |                             | -1,2                                   | $NaHCO_3$                     | 79 (CO)                           | [27]      |
| PCN-222(Fe)  |  |                             | -0,6                                   | $KHCO_3$                      | 91 (CO)                           | [28]      |
| MOF-1992 (Co)  |  | -0,63                       | 80 (CO)                                |                               | [29]                              |           |
| Cu-MOF-74  |  | -1,2                        | 85 (CO)                                |                               | [30]                              |           |
| Zn-MOF-74  |  | -1,2                        | 45 (CO)                                |                               | [30]                              |           |
| MIL-101-CoPpIX                                       |  | -0,9                        | 97,1 (CO)                              | [31]                          |                                   |           |
| $Ag_{12}bpy$ ; $Ag_{12}bpy-NH_2$ ; $Ag_{12}bpy-CH_3$ | Evaporação lenta do solvente             | Papel de carbono            | -2,0; -2,3 ( $CH_3$ ); -2,5 ( $NH_2$ ) | KOH                           | >95 (CO)                          | [32]      |
| Al-MIL-53  | Deposição por gota                       |                             | -1,1                                   | $K_2CO_3$                     | 21 (CO); 19 (HCOOH)               | [33]      |
| CR-MOF (Cu)  | -0,8                                     |                             | $KHCO_3$                               | 98 (HCOOH)                    | [34]                              |           |
| In-MFM-300   | Deposição catódica                       | Folha de índio              | -1,5                                   | $C_8H_{14}N_2O_2$             | 99,1 (HCOOH)                      | [35]      |
| PCN-222(Cu)/C  | Deposição por gota                       | Papel de carbono            | -0,7 a -0,9                            | $KHCO_3$                      | 44,3 (HCOOH)                      | [36]      |
| Nu-1000-Sn   | Revestimento por imersão                 |                             | -1,8 a -1,5                            | $KCl+H_2SO_4$                 | ±90 (HCOOH)                       | [36]      |
| In-BDC   | Deposição por gota                       |                             | -0,669                                 | $KHCO_3$                      | 88 (HCOO <sup>-</sup> )           | [37]      |
| Bi(btb)  | Deposição eletroforética                 | Carbono vítreo              | -0,97                                  | $KHCO_3$                      | 95 (HCOO <sup>-</sup> )           | [37]      |
| Zn-BTC   |  | Papel de carbono            | -1,6                                   | Líquidos iónicos de imidazole | 80 a 88 ( $CH_4$ )                | [38]      |
| HKUST-1  | Deposição por gota                       | Papel de carbono modificado | -1,6 a -1,8                            | $NaHCO_3$                     | ± 20 ( $CH_4$ )                   | [39]      |
| Cu-DBC   |  |                             | -0,9                                   | KOH                           | 80 ( $CH_4$ )                     | [40]      |
| Sn-THO   | Revestimento por imersão                 | Carbono vítreo              | -1,6                                   | $KHCO_3$                      | 46,5 ( $CH_4$ )                   | [41]      |
| Cu-ade   | Deposição por gota                       |                             | -1,4; -1,5                             |                               | 45 ( $C_2H_4$ ); 50 ( $CH_4$ )    | [42]      |
| n-MDC-250  |  |                             | -1,01                                  |                               | 60 ( $C_2H_4$ )                   | [43]      |
| HKUST-1  |  |                             | -1,9                                   | TBATFB/DMF                    | 51 ( $C_2H_2O_4$ )                | [43]      |
| HKUST-1  | Deposição por gota                       | Papel de carbono modificado | -0,3                                   | $KHCO_3$                      | 5,6 (MeOH); 10,3 (EtOH)           | [44]      |
| CuSn-HAB   |  | Revestimento por imersão    | Papel de carbono                       | -0,57                         | KOH                               | 56 (EtOH) |

apresentam uma seletividade variável para diversos produtos como por exemplo  $C_2H_4$ ,  $CH_3COOH$ ,  $CO$  e  $CH_4$  onde a seletividade é controlada a partir da utilização dos diferentes catalisadores e alteração de condições. Outro exemplo com comportamento semelhante foi também obtido por Liu e colaboradores [46].

### Considerações finais

As MOFs demonstram um enorme potencial como eletrocatalisadores para a redução do dióxido de carbono, contribuindo significativamente para o desenvolvimento de tecnologias sustentáveis e mitigação das alterações climáticas. A elevada porosidade, cristalinidade e área superficial, aliadas à disponibilidade de centros metálicos ativos, tornam as MOFs particularmente adequadas para estas aplicações. A capacidade de imobilizar estas estruturas em superfícies condutoras, superando as limitações de condutividade e estabilidade, é crucial para a sua eficácia como eletrocatalisadores.

Os métodos de imobilização, como deposição eletroforética, deposição por gota, deposição catódica e revestimento por imersão, têm demonstrado ser eficientes na formação de revestimentos de MOFs, permitindo a obtenção de altos índices de eficiência farádica. No entanto, cada técnica apresenta as suas vantagens e desafios, destacando a necessidade contínua de otimização para alcançar processos de produção escaláveis e economicamente viáveis.

A seletividade das MOFs na redução eletroquímica do  $CO_2$  é um fator crítico, com diferentes MOFs mostrando preferências variadas para a formação de produtos como  $CO$ ,  $HCOOH$ ,  $CH_4$  e outros hidrocarbonetos. A capacidade de ajustar a seletividade através da modificação estrutural dos catalisadores e das condições de reação é um campo de investigação promissor, apontando para a possibilidade de produção controlada de múltiplos produtos de valor acrescentado.

Os avanços apresentados indicam que, apesar dos

progressos significativos, há espaço para melhorias, especialmente em termos de aumento da seletividade e eficiência global dos processos catalíticos. O desenvolvimento de novos materiais e técnicas de imobilização, bem como a exploração de diferentes condições de reação, continuará a impulsionar o campo da eletrocatalise de  $CO_2$ , contribuindo para soluções inovadoras na luta contra o aquecimento global.

As MOFs representam uma fronteira promissora na pesquisa de eletrocatalisadores para a redução de  $CO_2$ . A sua versatilidade e eficácia destacam-se como pilares para o avanço de tecnologias limpas e sustentáveis, essenciais para o futuro do nosso planeta.

### Agradecimentos

O Centro de Química Estrutural é uma Unidade de Investigação financiada pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia através dos projetos UIDB/00100/2020 (doi.org/10.54499/UIDB/00100/2020) e UIDP/00100/2020 (doi.org/10.54499/UIDP/00100/2020). O Instituto de Ciências Moleculares é um Laboratório Associado financiado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia através do projeto LA/P/0056/2020 (doi.org/10.54499/LA/P/0056/2020). SR agradece à FCT pelo contrato 2020.02134.CEECIND (doi.org/10.54499/2020.02134.CEECIND/CP1605/CT0002). Paulo N. Martinho agradece à FCT e à RSC pelo apoio financeiro PTDC/QUI-QIN/0252/2021 (doi.org/10.54499/PTDC/QUI-QIN/0252/2021) e R21-7511142525. Paulo N. Martinho agradece à FCT pelo contrato CEECIND/00509/2017 (doi.org/10.54499/CEECIND/00509/2017/CP1387/CT0029).

### Nota

<sup>1</sup>Duarte Borralho e Mariana Ferreira partilham a posição de primeiro autor

### Referências

- [1] "The greenhouse effect", [bgs.ac.uk/discovering-geology/climate-change/how-does-the-greenhouse-effect-work](https://bgs.ac.uk/discovering-geology/climate-change/how-does-the-greenhouse-effect-work), n.d. (acedido em 15/05/2024).
- [2] R. Tuckett, Greenhouse Gases, in P. Worsfold, C. Poole, A. Townshend, M. Miró (ed.), "Encyclopedia of Analytical Science", 3<sup>rd</sup> edition, Volume 4, Elsevier 2019, 362-372.
- [3] H. Costa, E. Sprout, S. Teng, M. McDaniel, J. Hunt, D. Boudreau, T. Ramroop, K. Rutledge, H. Hall, "Greenhouse Effect," [education.nationalgeographic.org/resource/greenhouse-effect](https://education.nationalgeographic.org/resource/greenhouse-effect), 2023 (acedido em 15/05/2024).
- [4] "Global Temperature," [climate.nasa.gov/vital-signs/global-temperature/](https://climate.nasa.gov/vital-signs/global-temperature/)?intent=121, n.d. (acedido em 15/05/2024).
- [5] L. Li, X. Li, Y. Sun, Y. Xie, *Chem. Soc. Rev.* **2022**, 51, 1234-1252. DOI: 10.1039/D1CS00893E.
- [6] D. Narváez-Celada, A. S. Varela, *J. Mater. Chem. A Mater.* **2022**, 10, 5899-5917. DOI: 10.1039/D1TA10440C.
- [7] D. Gao, W. Li, H. Wang, G. Wang, R. Cai, *Transactions of Tianjin University* **2022**, 28, 245-264. DOI: 10.1007/s12209-022-00326-x.
- [8] C. Li, Y. Ji, Y. Wang, C. Liu, Z. Chen, J. Tang, Y. Hong, X. Li, T. Zheng, Q. Jiang, C. Xia, *Nano-Micro Lett.* **2023**, 15, 113. DOI: 10.1007/S40820-023-01092-8.
- [9] "How do Heterogeneous Catalysts Promote Sustainability?," [hidenanalytical.com/blog/how-heterogeneous-catalysts-promote-sustainability](https://hidenanalytical.com/blog/how-heterogeneous-catalysts-promote-sustainability), 2022. (acedido em 15/05/2024).
- [10] M. K. Lam, K. T. Lee, Scale-Up and Commercialization of Algal Cultivation and Biofuel Production, A. Pandey, D.-J. Lee, Y. Chisti, C. R. Soccol (ed.), "Biofuels from Algae", Elsevier **2014**, 261-286.
- [11] D. I. Ugwu, J. Conradie, *J. Mol. Struct.* **2023**, 1293, 136275. DOI: 10.1016/j.molstruc.2023.136275.
- [12] D. Kim, X. Liu, M. S. Lah, *Inorg. Chem. Front.* **2015**, 2, 336-360. DOI: 10.1039/C4QI00236A.
- [13] M. O'Keefe, O. M. Yaghi, *Chem. Rev.* **2012**, 112, 675-702. DOI: 10.1021/cr200205j.
- [14] P. Banoth, C. Kandula, P. Kollu, Introduction to Electrocatalysts, R. K. Gupta (ed.), "Noble Metal-Free Electrocatalysts: New Trends in Electrocatalysts for Energy Applications. Volume 2", American Chemical Society, **2022**, 1-37.
- [15] L. Jiao, Y. Wang, H. Jiang, Q. Xu, *Adv. Mat.* **2018**, 30, 1703663. DOI: 10.1002/adma.201703663.



- [16] X. Shi, Y. Shan, M. Du, H. Pang, *Coord. Chem. Rev.* **2021**, 444, 214060. DOI: 10.1016/J.CCR.2021.214060.
- [17] Y. Zhang, C.-H. Chang, *Processes* **2020**, 8, 377. DOI: 10.3390/PR8030377.
- [18] C. Crivello, S. Sevim, O. Graniel, C. Franco, S. Pane, J. Puigmarti-Luis, D. Munoz-Rojas, *Mater. Horiz.* **2021**, 8, 168-178. DOI: 10.1039/D0MH00898B.
- [19] L. Besra, M. Liu, *Prog. Mater. Sci.* **2007**, 52, 1-61. DOI: 10.1016/J.PMATSCI.2006.07.001.
- [20] S. Xie, W. Monnens, K. Wan, W. Zhang, W. Guo, M. W. Xu, I. F. J. Vankelecom, X. Zhang, J. Fransaer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 24950-24957. DOI: 10.1002/ANIE.202108485.
- [21] "Depositing Monolayers & Thin Films of Nanoparticles," nanocomposix.com/pages/depositing-monolayers-and-thin-films-of-nanoparticles, n.d. (accedido em 15/05/2024).
- [22] C. Passmore, J. Atkinson, E. Spooner, "Thin Film Deposition: Comparing Coating Methods," ossila.com/pages/solution-processing-techniques-comparison, n.d. (accedido em 15/05/2024).
- [23] Y. Sun, C. Dall'Agnese, C. Zhang, L. Yang, X. Jin, Y. Dall'Agnese, X. F. Wang, *MXenes and their Composites: Synthesis, Properties and Potential Applications*. **2022**, 449-498. DOI: 10.1016/B978-0-12-823361-0.00007-1.
- [24] N. Kornienko, Y. Zhao, C. S. Kley, C. Zhu, D. Kim, S. Lin, C. J. Chang, O. M. Yaghi, P. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 14129-14135. DOI: 10.1021/jacs.5b08212.
- [25] I. Hod, M. D. Sampson, P. Deria, C. P. Kubiak, O. K. Farha, J. T. Hupp, *ACS Catal.* **2015**, 5, 6302-6309. DOI: 10.1021/acscatal.5b01767.
- [26] X. Jiang, H. Li, J. Xiao, D. Gao, R. Si, F. Yang, Y. Li, G. Wang, X. Bao, *Nano Energy* **2018**, 52, 345-350. DOI: 10.1016/j.nanoen.2018.07.047.
- [27] T. Zhang, H. Liu, X. Han, M. Biset-Peiró, Y. Yang, I. Imaz, D. MasPOCH, B. Yang, J. R. Morante, J. Arbiol, *Dalton Trans.* **2023**, 52, 5234-5242. DOI: 10.1039/d3dt00185g.
- [28] B.-X. Dong, S.-L. Qian, F.-Y. Bu, Y.-C. Wu, L.-G. Feng, Y.-L. Teng, W.-L. Liu, Z.-W. Li, *ACS Appl. Energy Mater.* **2018**, 1, 4662-4669. DOI: 10.1021/acsaem.8b00797.
- [29] R. Matheu, E. Gutierrez-Puebla, M. Á. Monge, C. S. Diercks, J. Kang, M. S. Prévot, X. Pei, N. Hanikel, B. Zhang, P. Yang, O. M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 17081-17085. DOI: 10.1021/jacs.9b09298.
- [30] T. V. Phuc, S. G. Kang, J. S. Chung, S. H. Hur, *Mater. Res. Bull.* **2021**, 138, 111228. DOI: 10.1016/j.materresbull.2021.111228.
- [31] A. Bohan, X. Jin, M. Wang, X. Ma, Y. Wang, L. Zhang, *J. Colloid Interface Sci.* **2024**, 654, 830-839. DOI: 10.1016/j.jcis.2023.10.089.
- [32] Y. Y. Liu, J. R. Huang, H. L. Zhu, P. Q. Liao, X. M. Chen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202311265. DOI: 10.1002/anie.202311265.
- [33] M. Lee, A. De Riccardis, R. V. Kazantsev, J. K. Cooper, A. K. Buckley, P. W. W. Burroughs, D. M. Larson, G. Mele, F. M. Toma, *ACS Appl. Energy Mater.* **2020**, 3, 1286-1291. DOI: 10.1021/acsaem.9b02210.
- [34] X. Kang, B. Wang, K. Hu, K. Lyu, X. Han, B. F. Spencer, M. D. Frogley, F. Tuna, E. J. L. McInnes, R. A. W. Dryfe, B. Han, S. Yang, M. Schröder, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 17384-17392. DOI: 10.1021/jacs.0c05913.
- [35] R. Hinogami, S. Yotsuhashi, M. Deguchi, Y. Zenitani, H. Hashiba, Y. Yamada, *ECS Electrochem. Lett.* **2012**, 1, H17-H19. DOI: 10.1149/2.001204eel.
- [36] H. Xue, Z. H. Zhao, P. Q. Liao, X. M. Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 16978-16982. DOI: 10.1021/jacs.3c05023.
- [37] P. Lamagni, M. Miola, J. Catalano, M. S. Hvid, M. A. H. Mamakhel, M. Christensen, M. R. Madsen, H. S. Jeppesen, X.-M. Hu, K. Daasbjerg, T. Skrydstrup, N. Lock, *Adv. Funct. Mater.* **2020**, 30, 1910408. DOI: 10.1002/adfm.201910408.
- [38] X. Kang, Q. Zhu, X. Sun, J. Hu, J. Zhang, Z. Liu, B. Han, *Chem. Sci.* **2016**, 7, 266-273. DOI: 10.1039/C5SC03291A.
- [39] Y. Zhang, L.-Z. Dong, S. Li, X. Huang, J.-N. Chang, J.-H. Wang, J. Zhou, S.-L. Li, Y.-Q. Lan, *Nat. Commun.* **2021**, 12, 6390. DOI: 10.1038/s41467-021-26724-8.
- [40] Z. H. Zhao, J. R. Huang, P. Q. Liao, X. M. Chen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202301767. DOI: 10.1002/anie.202301767.
- [41] F. Yang, A. Chen, P. L. Deng, Y. Zhou, Z. Shahid, H. Liu, B. Y. Xia, *Chem. Sci.* **2019**, 10, 7975-7981. DOI: 10.1039/c9sc02605c.
- [42] S. Kim, D. Shin, J. Park, J.-Y. Jung, H. Song, *Adv. Sci.* **2023**, 10, 2207187. DOI: 10.1002/advs.202207187.
- [43] R. Senthil Kumar, S. Senthil Kumar, M. Anbu Kulandainathan, *Electrochem. commun.* **2012**, 25, 70-73. DOI: 10.1016/j.elecom.2012.09.018.
- [44] Z. H. Zhao, J. R. Huang, P. Q. Liao, X. M. Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 26783-26790. DOI: 10.1021/jacs.3c08974.
- [45] R. Chen, L. Cheng, J. Liu, Y. Wang, W. Ge, C. Xiao, H. Jiang, Y. Li, C. Li, *Small* **2022**, 18, 2200720. DOI: 10.1002/SMLL.202200720.
- [46] C. Liu, M. Wang, J. Ye, L. Liu, L. Li, Y. Li, X. Huang, *Nano Lett.* **2023**, 23, 1474-1480. DOI: 10.1021/acs.nanolett.2c04911.

&gt;

**\*Duarte Borrhalho**

*Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.*

Terminou o Mestrado em Química na área de inorgânica, concluindo a dissertação com o tema de desenvolvimento de revestimentos de MOFs, utilizando deposição eletroforética, para a conversão eletroquímica de amoníaco em hidrogénio.

fc51349@alunos.ciencias.ulisboa.pt

ORCID.org/0000-0001-5819-8265

&gt;

**\*Mariana Ferreira**

*Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.*

Aluna de Mestrado em Química, está a realizar a dissertação na área de inorgânica, mais especificamente na conversão de dióxido de carbono utilizando estruturas supramoleculares.

fc53039@alunos.ciencias.ulisboa.pt

ORCID.org/0009-0000-6998-9273

&gt;

**Paulo N. Martinho**

*Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.*

Paulo Martinho é investigador auxiliar no Centro de Química Estrutural e tem desenvolvido trabalho na área da química de coordenação, em particular na síntese de moléculas e preparação de materiais com aplicações em magnetismo molecular e fotocatalise para ativação de CO<sub>2</sub>.

pnmartinho@ciencias.ulisboa.pt

https://orcid.org/0000-0003-2552-6263

&gt;

**Sara Realista**

*Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.*

Sara Realista é investigadora júnior no Centro de Química Estrutural e tem desenvolvido trabalho na área de inorgânica, eletroquímica e em catalise (química, eletro- e fotocatalise).

smrealista@ciencias.ulisboa.pt

ORCID.org/0000-0003-1704-2242

# Economia Circular na Indústria Azul: Valorização do Óleo Resultante da Produção de Conserva de Atum

>  
Rodrigo Borges  
Eduardo Esteves  
Jaime Aníbal  
Sara Raposo  
Rui Cruz  
Patrícia Nunes

## **Circular Economy in the Blue Industry: Valorization of Oil From Canned Tuna**

**Production.** Canned tuna (*Katsuwonus pelamis*) is a traditional product in Portugal and is very important for its culture and cuisine. One of the main by-products of the canning process is tuna oil, which has great potential for valorization due to its high content of omega-3 polyunsaturated fatty acids, such as docosahexaenoic acid (DHA). Valorizing the oil rather than discarding it as waste would significantly increase the sustainability and profitability of the canning process. By analyzing the quality of the oil before and after the installation of new equipment that allows a more efficient separation of the oil from other sub-products and residues at the Cofaco Açores cannery, including the analysis of the fatty acid profile and safety parameters for human consumption, the potential applications of the resulting tuna oil are being evaluated. Based on the expected properties of this fish oil, it could have various applications, from the enrichment of cosmetic products to the production of biofuels and, above all, as a nutraceutical food supplement. According to an initial estimate based on the available scientific literature, the most promising application for the generated oily by-product will be the production of nutraceutical supplements, namely encapsulated formulations, marketed at an average price of €460/kg.

O atum enlatado (*Katsuwonus pelamis*) é um produto tradicional e bastante relevante na cultura e culinária de Portugal. Um dos resíduos principais do processo de enlatamento do atum é o óleo, que devido à sua riqueza em determinados ácidos gordos polinsaturados ómega-3, tal como o ácido docosa-hexaenóico (DHA), tem um grande potencial de ser valorizado como subproduto, aumentando a sustentabilidade e o retorno económico do processo de conserva. Através da análise da qualidade do óleo antes e depois da montagem de equipamento que permite a separação mais eficiente do óleo de outros subprodutos e resíduos na fábrica de conservas Cofaco Açores, que incluem principalmente o perfil de ácidos gordos e parâmetros de segurança para consumo humano, estão a ser averiguadas as potenciais aplicações para o óleo de atum. Devido às características esperadas para este óleo de peixe, o mesmo poderá ter várias aplicações, desde o enriquecimento de produtos de cosmética, à produção de biocombustíveis e, principalmente, como suplementos alimentares nutracéuticos. A aplicação mais promissora para o subproduto oleoso gerado, considerando uma primeira estimativa com base na literatura científica disponível, será a produção de suplementos nutracéuticos, designadamente em forma encapsulada, comercializados com valores médios de 460 €/kg.

## **Introdução**

O enlatado tem sido um dos métodos preferidos da conservação de peixe em Portugal, juntamente com o congelado e o seco ou salgado, tornando-se um dos comércios mais importantes do país, com uma tradição

de exportação que data desde o século XIX [1]. Durante a Segunda Guerra Mundial, foi o segundo produto mais exportado por Portugal, tornando-se bastante importante para a economia durante o período do

Estado Novo. No período inicial após a Restauração da Independência as vendas do peixe enlatado entraram em declínio, no entanto a produção de enlatados manteve-se relativamente estável e eventualmente o número de vendas foi recuperado [2].

No processamento industrial do peixe, até 70% do pescado podem ser considerados como resíduos. O tratamento e eliminação correta destes resíduos, constituídos principalmente por resíduos sólidos biológicos, óleo de peixe e águas residuais, pode acrescentar um elevado custo ao processamento. Uma abordagem mais moderna é a implementação de um processamento economicamente viável dos resíduos em subprodutos de valor acrescentado. Alguns destes subprodutos podem ser realisticamente integrados em alimentação humana, como por exemplo *patê* de peixe, tal como em ração animal contendo bastantes benefícios do ponto de vista nutricional [3]. Esta abordagem está em linha com as orientações europeias e mundiais, tal como a *Waste Framework Directive* elaborada pela Comissão Europeia, relativamente à redução de desperdícios e resíduos alimentares com metas de atingir uma economia mais verde e circular [4]. Da mesma forma, esta abordagem enquadra-se nos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), como por exemplo o objetivo 12 que visa assegurar padrões de consumo e produção sustentáveis ou o objetivo 14 que visa conservar e utilizar de forma sustentável os oceanos, mares e recursos marinhos para um desenvolvimento sustentável, delineados na Agenda para Desenvolvimento Sustentável até 2030 das Nações Unidas [5].

Um estudo numa fábrica de conserva de atum [6] mostrou que o reaproveitamento de subprodutos, para produzir *patês*, farinha e óleo de peixe, reduziu significativamente a carga biológica, diminuindo o impacto ambiental. No mesmo estudo, verificaram que o gasto energético principal ocorre na pesca e no enlatamento, destacando a rentabilidade do processamento de subprodutos. O óleo de peixe, sendo rico em ácidos gordos polinsaturados da classe  $\omega$ -3, possui uma variedade de efeitos nutracêuticos benéficos, incluindo prevenção de doenças cardiovasculares, doença de Alzheimer, ou até cancro, tratamento de doenças como obesidade e diabetes de tipo-2, funções regulatórias e redução do risco de doenças cardiovasculares, podendo ser consumido como suplemento alimentar encapsulado [7]. No entanto, para a obtenção de óleo de peixe de qualidade superior é necessário, entre outros fatores, instalar equipamentos eficientes na separação do óleo de outros subprodutos e resíduos, nomeadamente subprodutos sólidos e aquosos, recolha e armazenamento do óleo de forma a evitar a sua oxidação.

O presente estudo foi realizado no âmbito de

um projeto financiado pela *EEA Grants* no âmbito do Programa Crescimento Azul, gerido pela Direção-Geral de Política do Mar, em que se pretende aumentar a sustentabilidade na produção de enlatados de atum-bonito (*Katsuwonus pelamis*) pela empresa Cofaco Açores – Indústria de Conservas, S. A.. As quantidades consideráveis de resíduos e subprodutos produzidos, especialmente oleosos, resultam em custos adicionais de descarte, para além do peso ambiental, que poderão ser diminuídos através de melhoramentos do sistema de processamento dos subprodutos gerados. A redução da carga de resíduos produzidos poderá ser atingida, nomeadamente, com a implementação de uma centrífuga e um decantador de capacidade superior, para uma produção em série, relativamente aos previamente instalados. Este equipamento permite efetuar a separação das três fases de resíduos e subprodutos (sólido, aquoso e oleoso) com maior eficiência, reduzindo a carga de subprodutos descartados na fase aquosa que se destina à estação de tratamento de águas. A obtenção de uma fração oleosa com menos subprodutos sólidos e menos frações de resíduos aquosos permitirá, por um lado, a valorização do óleo de peixe e, por outro, melhorar a qualidade da farinha de peixe produzida a partir da fração sólida.

Para esta finalidade, foram realizadas as colheitas de amostras de atum-bonito cru e cozinhado, de subproduto total sólido, resíduo aquoso e subproduto oleoso antes e depois da montagem do equipamento para investigar a qualidade dos subprodutos produzidos. O óleo final será também comparado com os produtos disponíveis no mercado de forma a averiguar a finalidade mais indicada para este subproduto. Para a análise da qualidade do subproduto oleoso foram consideradas duas vertentes, a qualidade nutricional do óleo, nomeadamente através da caracterização do perfil de ácidos gordos, e o risco de segurança alimentar. Neste trabalho, pretende-se enfatizar a necessidade e os benefícios de implementar um plano mais sustentável para a recuperação de subprodutos na indústria de conservas tal como, perspetivar os potenciais destinos para o subproduto resultante.

### Metodologia

De forma a avaliar as propriedades físico-químicas das amostras sólidas e líquidas, foram delineadas análises que consideram os pontos essenciais da qualidade do pescado e dos subprodutos. O planeamento de amostras envolve análises variadas conforme o tipo de amostra. As análises destinadas às amostras sólidas englobam análise do pH, cor, atividade da água ( $a_w$ ), teor de humidade, teor de cinza, teor proteico, teor de lípidos, caracterização dos ácidos gordos e avaliação do grau de oxidação dos lípidos (índice de peróxidos e

índice de substâncias reativas ao ácido tiobarbitúrico). As análises destinadas à fração oleosa, assim como à fração aquosa, englobam a análise do pH, cor, análises de avaliação à oxidação de lípidos, teor de sólidos suspensos, caracterização dos ácidos gordos e viscosidade.

As análises seguiram metodologias habituais e normalizadas: teor proteico determinado pelo método clássico de Kjeldahl utilizando um digestor (UDK 129, VELP Scientifica, Itália) [8]; índice de peróxidos de acordo com o método descrito no AOAC e o teor de substâncias reativas ao ácido tiobarbitúrico adaptado da Norma Portuguesa [9,10]; e, após extração dos lípidos das amostras sólidas pelo método de Bligh & Dyer e esterificação pelo método descrito por Christie, foi realizada a análise por cromatografia gasosa (GC) para determinação do perfil de ácidos gordos [11,12].

## Resultados esperados

Com o projeto pretende-se a obtenção de uma fração oleosa que possua o mínimo de fase aquosa e de subprodutos sólidos o que permitirá, por um lado, a valorização do óleo de peixe em termos de composição de ácidos gordos e, complementarmente, melhorar a qualidade da farinha de peixe produzida a partir da fração sólida em termos de teor em proteína.

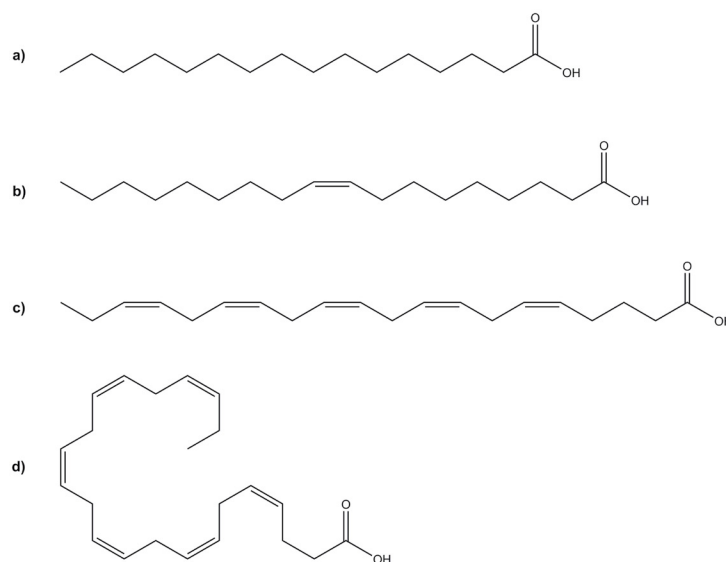
A qualidade da matéria-prima e dos seus subprodutos na fábrica é elevada e controlada regularmente. Ainda que exista alguma variação das características em função da biologia e ecologia dos peixes e da logística e operação, espera-se que os resultados a obter sejam semelhantes aos valores reportados na literatura científica relativa à espécie *K. pelamis*. Todavia, não existem muitos estudos publicados, particularmente em anos mais recentes. Este trabalho, vem atualizar e completar a informação disponível.

O teor de proteínas encontrado na literatura consultada para o músculo de *K. pelamis* cru varia entre 21,63 e 24,13% do peso total [13,14]. No entanto os valores reportados para o peixe cozinhado variam entre 25,7 e 27,6% [15]. Esta variação terá a ver com a perda de humidade durante a cozedura (na literatura uma redução de 72-75 para 70-71%) [13,15,16]. Todavia, é reportado na literatura uma elevada concentração de proteína para a farinha de peixe preparada a partir dos subprodutos sólidos de peixe atingindo até 70% de proteína do peso total, sendo a farinha também rica em fósforo e cálcio, possuindo um elevado valor nutricional [17].

O principal objetivo do projeto é a valorização do óleo de peixe em termos de composição de ácidos gordos. No que diz respeito ao teor de lípidos esperado em fresco é reportado entre 0,4 e 0,6% do peso total para o músculo branco, sendo reportado até 1,52% do peso total para o músculo escuro [13,14,16]. Para *K. pelamis* cozinhado, os valores publicados variam entre

1,4 e 2,3% para diferentes regiões ou órgãos do peixe (e.g., fígado) [15]. Mais do que o teor em gordura, o atum-bonito é nutricionalmente interessante devido à composição em ácidos gordos [18]. Os perfis reportados de ácidos gordos no músculo são bastante variados (Tabela 1). Os ácidos gordos principais são o ácido docosa-hexaenóico (DHA, C22:6), o mais comum, seguido geralmente do ácido palmítico (C16:0) e do ácido oleico (C18:1). É importante notar também a presença de ácido eicosapentaenóico (EPA; C20:5). As estruturas moleculares destes ácidos gordos mais comuns encontram-se representadas na figura 1.

Figura 1 - Estruturas moleculares dos ácidos gordos: (a) palmítico (C16:0), (b) oleico (C18:1), (c) eicosapentaenóico (EPA; C20:5) e (d) docosa-hexaenóico (DHA, C22:6).



Os valores indicados representam o que é esperado no pescado cru e cozinhado. Num contexto de processamento industrial é possível que a razão entre ácidos gordos sofra alguma variação conforme a exposição ao tratamento, logo são esperadas pequenas variações, possivelmente causadas pela degradação de ácidos gordos menos estáveis, como os que possuem cadeias de carbono mais compridas e menos ligações duplas.

Os valores reportados na literatura poderão dar uma indicação dos valores esperados, no entanto existem vários fatores que geram uma grande variabilidade em todos os valores referidos, designadamente o local de pesca, a estação do ano, ou os alimentos disponíveis para os peixes [21]. Apesar desta variabilidade, os valores na tabela 1 poderão ser indicadores representativos do que se espera obter.

A valorização do óleo obtido após a implementação dos equipamentos e processos na fábrica dependerá da qualidade e pureza do óleo, ou seja, a ausência de resíduos contaminantes no óleo, resultante da eficiência do processo. As potenciais aplicações do

óleo de peixe, como referidas anteriormente, podem ser variadas, desde produção de biocombustíveis, às suas propriedades benéficas em produtos de cosmética e cuidado da pele, o seu valor nutricional como suplemento alimentar, e as suas propriedades benéficas reportadas em tratamentos clínicos incluindo artrite reumatoide, prevenção de parto prematuro e, principalmente, em doenças e desregulações cardiovasculares [22-24]. Um dos destinos finais para o óleo de peixe que aparenta ser bastante exequível é a sua encapsulação e comercialização como suplemento alimentar nutracêutico. De facto, o custo deste tipo de cápsulas de concentrado de óleo de peixe em Portugal varia entre os 0,36 €/cápsula (1 g) e os 0,72 €/ cápsula (1,3 g). Estes valores resultam numa média de 0,46 €/g de óleo de peixe, ou seja 460 €/kg (valores de janeiro de 2024). É necessário considerar o custo de encapsulação industrial, contudo os valores de mercado permitem ter perceção do potencial rendimento gerado do aproveitamento do óleo gerado no processo de enlatamento.

### Conclusões

As vantagens apresentadas para a valorização do óleo produzido como subproduto da indústria de conserva de atum aparentam ser bastante otimistas e promissoras tanto do ponto de vista da preservação do ambiente e sustentabilidade para a empresa Cofaco Açores. A aplicação mais indicada para o subproduto oleoso gerado, considerando uma primeira aferição estimativa com base na literatura científica disponível será a produção de suplementos nutracêuticos, provando-se um subproduto economicamente viável, mesmo considerando a venda do óleo em bruto para o mesmo fim. Apesar das estimativas, apenas depois de finalizadas todas as análises em curso será possível obter conclusões mais aproximadas da realidade. Os resultados referidos serão divulgados numa publicação futura.

### Agradecimentos

O projeto *Green Fish oil from blue industry* (PT-INNOVATION-0091) é financiado pelo *EEA Grants* no âmbito do Programa Crescimento Azul gerido pela Direção-Geral de Política do Mar. Os autores agradecem à Universidade do Algarve através do CIMA (doi.org/10.54499/UIDB/00350/2020; doi.org/10.54499/UIDB/00350/2020); Laboratório Associado ARNET (doi.org/10.54499/LA/P/0069/2020); CCMAR (doi.org/10.54499/UIDB/04326/2020; doi.org/10.54499/UIDB/04326/2020); doi.org/10.54499/LA/P/0101/2020); MED (doi.org/10.54499/UIDB/05183/2020; doi.org/10.54499/UIDB/05183/2020) e CHANGE (doi.org/10.54499/LA/P/0121/2020).

Tabela 1 - Proporção de ácidos gordos em *Katsuwonus pelamis* reportados na literatura.

| Ácidos Gordos                                | Perfil de Ácidos Gordos (%) |      |                   |      |      |
|--|-----------------------------|------|-------------------|------|------|
|  | [14]                        | [19] | [19] <sup>a</sup> | [20] | [16] |
| <b>Saturados</b>                             |                             |      |                   |      |      |
| Caprílico (C8:0)                             | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,0  |
| Láurico (C12:0)                              | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,0  |
| Mirístico (C14:0)                            | 2,0                         | 2,8  | 5,8               | 8,6* | 1,7  |
| Pentadecanóico (C15:0)                       | 0,7                         | 1,1  | 1,8               | n/a  | 0,6  |
| Palmitico (C16:0)                            | 21,9                        | 21,9 | 24,8              | 25,5 | 14,5 |
| Margárico (C17:0)                            | n/a                         | 1,8  | 2,7               | n/a  | 1,0  |
| Esteárico (C18:0)                            | 11,7                        | 7,6  | 7,1               | 9,6  | 7,6  |
| Araquídico (C20:0)                           | n/a                         | 0,5  | 0,5               | 0,5  | 0,4  |
| Beénico (C22:0)                              | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,4  |
| Lignocérico (C24:0)                          | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,3  |
| <b>Monoinsaturados</b>                       |                             |      |                   |      |      |
| Palmitoleico (C16:1)                         | 2,5                         | 4,4  | 8,3               | 8,6* | 2,1  |
| Oleico (C18:1)                               | 10,0                        | 17,5 | 21,6              | 7,1  | 7,7  |
| Vacénico (C18:1-n7)                          | 2,1                         | n/a  | n/a               | n/a  | n/a  |
| cis-12-Octadecenóico                         | n/a                         | 2,7  | 3,7               | n/a  | n/a  |
| Gadoleico (C20:1-n11)                        | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,4  |
| Gondoico (C20:1-n9)                          | n/a                         | 1,5  | 1,4               | 0,4  | n/a  |
| cis-13-Docosenóico (C22:1)                   | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,1  |
| Nervoico (C24:1-n9)                          | n/a                         | n/a  | n/a               | n/a  | 0,4  |
| <b>Polinsaturados</b>                        |                             |      |                   |      |      |
| (9Z,12Z)-Hexadecadienoato (C16:2)            | n/a                         | 1,4  | 2,0               | n/a  | n/a  |
| Rugosânico (C16:3)                           | n/a                         | 0,9  | 1,2               | n/a  | n/a  |
| cis-4,7,10,13-Hexadecatetraenóico (C16:4-n3) | n/a                         | 0,1  | 0,2               | n/a  | n/a  |
| cis-11,14-Octadecadienóico (C18:2n-4)        | n/a                         | 0,1  | 0,3               | n/a  | n/a  |
| Linoleico (C18:2-n6)                         | 1,4                         | 1,1  | 1,3               | 1,3  | 1,0  |
| Linolénico (C18:3-n3)                        | 0,1                         | 0,4  | 0,6               | 0,3  | 0,3  |
| Araquidónico (C20:4)                         | 0,3                         | 2,1  | 1,3               | 2,2  | 1,3  |
| Eicosapentaenóico (EPA) (C20:5)              | 4,7                         | 3,8  | 2,2               | 9,7  | 3,5  |
| Adrénico (C22:4)                             | 6,0                         | n/a  | 1,2               | n/a  | n/a  |
| Docosapentaenóico (DPA) (22:5)               | 1,1                         | 1,4  | 0,4               | n/a  | n/a  |
| Docosa-hexaenóico (DHA) (C22:6)              | 35,7                        | 21,8 | 12,2              | 32,8 | 19,3 |

<sup>a</sup> Cozinhado. \* Os autores apresentam de forma englobada estes dois ácidos gordos.

### Referências

- [1] A. O. Madsen, V. Chkoniya, *Eur. J. Soc. Sci.* **2023**, 6, 21-43. DOI: 10.2478/eujss-2023-0013.
- [2] T. Bjørndal, A. Brasão, J. Ramos, A. Tusvik, *Marine Policy* **2016**, 72, 94-106. DOI: 10.1016/j.marpol.2016.06.011.[3]
- [3] R. L. Olsen, J. Toppe, I. Karunasagar, *Trends Food Sci. Technol.* **2014**, 36, 144-151. DOI: 10.1016/j.tifs.2014.01.007.
- [4] Diretiva 2008/98/EC de 19 de Novembro de 2018. Parlamento Europeu e Conselho. data.europa.eu/eli/dir/2008/98/2018-07-05.

- [5] Transforming Our World: The 2030 Agenda For Sustainable Development. United Nations. 2022. [sustainabledevelopment.un.org/post2015/transformingourworld/publication](https://sustainabledevelopment.un.org/post2015/transformingourworld/publication). (acedido em 09/02/2024).
- [6] A. Cortés, X. Esteve-Llorens, S. González-García, M. T. Moreira, G. Feijoo, *Sci. Total Environ.* **2021**, 791, 148249. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.148249.
- [7] A. Jamshidi, H. Cao, J. Xiao, J. Simal-Gandara. *Food Res. Int.* **2020**, 137, 109353. DOI: 10.1016/j.foodres.2020.109353.
- [8] J. Kjeldahl, *Zeitschrift für analytische Chemie* **1883**, 22, 366-383.
- [9] NP904 - Determinação do Índice de Peróxidos. Instituto Português da Qualidade (IPQ). **1987**, 6.
- [10] G. W. Latimer, "981.10 - Protein Determination in Meat," em *Official Methods of Analysis (20<sup>th</sup> Edition)*, AOAC INTERNATIONAL, **2016**.
- [11] E. G. Bligh, W. J. Dyer, *Can. J. Biochem. Physiol.* **1959**, 37, 911-917. DOI: 10.1139/o59-099.
- [12] W. W. Christie, "Gas Chromatography and Lipid: A Practical Guide", 2<sup>nd</sup> ed., The Oily Press Ltd., Somerset, **1984**, 37-38.
- [13] J. K. Hyeon, J. K. Min, H. K. Ki, J. J. Seung, H. L. Kyung, H. P. Kwon, H. S. Joon, S. H. Min, K. Jin-Soo, *Korean J. Fish. Aquat. Sci.* **2012**, 45, 307-316. DOI: 10.5657/KFAS.2012.0307.
- [14] A. S. Mahaliyana, B. K. K. K. Jinadasa, N. P. P. Liyanage, G. D. T. M. Jayasinghe, S. C. Jayamanne, *Am. J. Food Nutr.* **2015**, 3, 106-111. DOI: 10.12691/ajfn-3-4-3.
- [15] L. Shulai, L. Xiangyang, Z. Xuxia, Z. Xilin, D. Yuting, *Food Sci. Biotechnol.* **2014**, 23, 1397-1404. DOI: 10.1007/s10068-014-0191-4.
- [16] S. S. Nurjanah, T. P. P. E. Y. Jidayat, T. Arifianto, *Int. Food Res. J.* **2015**, 22, 2093-2102. URL: [ifjr.upm.edu.my/22%20\(05\)%202015/\(49\).pdf](http://ifjr.upm.edu.my/22%20(05)%202015/(49).pdf).
- [17] L. Abbey, M. Glover-Amengor, M. O. Atikpo, A. Atter, J. Toppe, *Food Sci. Nutr.* **2016**, 5, 374-379. DOI: 10.1002/fsn3.402.
- [18] M. Alvionita, A. A. R. F. Dewi, "The effect of food processing methods on yellowfin tuna (*Thunus albacares*) nutrition", *AIP Conf. Proc.* **2023**, 2634, 020054. DOI:10.1063/5.0112416.
- [19] C.-W. Lim, S. W. Sung, M. S. Heu, J.-S. Kim, *Korean J. Fish. Aquat. Sci.* **2017**, 50, 473-480. DOI: 10.5657/KFAS.2017.0473.
- [20] T. Tanabe, T. Suzuki, M. Ogura, Y. Watanabe, *Fish. Sci.* **1999**, 65, 806-807. DOI: 10.2331/fishsci.65.806.
- [21] P. M. Jangaard, R. G. Ackman, J. C. Sipos, *J. Fish. Res. Bd. Canada* **1967**, 24, 613-627. DOI: 10.1139/f67-053.
- [22] H. Tse-Hung, W. Pei-Wen, Y. Shih-Chun, C. Wei-Ling, F. Jia-You, *Mar. Drugs* **2018**, 16, 256. DOI: 10.3390/md16080256.
- [23] Y. M. Tayib, F. Al-Sheikh, Z. M. Shakor, W. A. Anderson, *Biofuels* **2024**, 15, 115-128. DOI: 10.1080/17597269.2023.2214417.
- [24] R. Oh, *J. Am. Board Fam. Pract.* **2005**, 18, 28-36. DOI: 10.3122/jabfm.18.1.28.

&gt;

**Eduardo Esteves**

Instituto Superior de Engenharia da Universidade do Algarve.

CCMAR-Centro de Ciências do Mar do Algarve.

Professor Coordenador no Departamento de Engenharia Alimentar do Instituto Superior de Engenharia (ISE) da Universidade do Algarve e membro do CCMAR-Centro de Ciências do Mar do Algarve. Os interesses de investigação são o estudo (e modelação estatística) da dinâmica da perda de frescura e a deterioração de produtos da pesca e aquicultura relacionadas para o controlo de qualidade e a estimação do tempo de conservação útil; e o estudo e otimização de técnicas (inspiradas nos processos) de índole tradicional de transformação de produtos da pesca e aquicultura para valorização de subprodutos do pescado e espécies de reduzido valor económico.

[eeesteves@ualg.pt](mailto:eeesteves@ualg.pt)

ORCID.org/0000-0002-1872-8185

&gt;

**Jaime Anibal**

Instituto Superior de Engenharia da Universidade do Algarve.

Centro de Investigação Marinha e Ambiental.

Professor Adjunto no Departamento de Engenharia Alimentar do Instituto de Engenharia da Universidade do Algarve. Atualmente, a sua pesquisa centra-se nos efeitos das alterações ambientais sobre a qualidade alimentar, com ênfase em: dinâmica da perda de frescura do pescado e desenvolvimento de novos

indicadores de deterioração; valorização de subprodutos do pescado e espécies de baixo valor económico; e o uso sustentável da água para atividades humanas. É também membro da Comissão Científica do CIMA-Centro de Investigação Marinha e Ambiental da Universidade do Algarve.

[janibal@ualg.pt](mailto:janibal@ualg.pt)

ORCID.org/0000-0002-9704-5824

&gt;

**Patrícia Nunes**

Instituto Superior de Engenharia da Universidade do Algarve.

MED - Instituto Mediterrâneo para a Agricultura, Ambiente e Desenvolvimento. CHANGE - Instituto para as Alterações Globais e Sustentabilidade.

Professora Adjunta no Departamento de Engenharia Alimentar do Instituto de Engenharia da Universidade do Algarve. Desenvolve o seu trabalho de investigação como colaboradora no Centro de Investigação MED - Instituto Mediterrâneo para a Agricultura, Ambiente e Desenvolvimento (Polo UAlG) e Laboratório Associado CHANGE-Instituto para as Alterações Globais e Sustentabilidade, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade do Algarve. Os seus interesses de investigação abordam os temas: valorização de sementes de frutos na obtenção de óleos, e valorização de subprodutos de diferentes setores da indústria alimentar, nomeadamente da indústria da produção de vinagres.

[panunes@ualg.pt](mailto:panunes@ualg.pt)

ORCID.org/0000-0002-7148-8950

&gt;

**Rodrigo Borges**

Centro de Investigação Marinha e Ambiental.

Licenciado e Mestre em Biotecnologia pela Universidade do Algarve, é investigador bolseiro no Centro de Investigação Marinha e Ambiental (CIMA) da Universidade do Algarve.

[rodrigues@ualg.pt](mailto:rodrigues@ualg.pt)

ORCID.org/0000-0003-4245-1881

&gt;

**Rui Cruz**

Instituto Superior de Engenharia da Universidade do Algarve.

MED - Instituto Mediterrâneo para a Agricultura, Ambiente e Desenvolvimento. CHANGE - Instituto para as Alterações Globais e Sustentabilidade.

Professor Adjunto no Departamento de Engenharia Alimentar do Instituto de Engenharia da Universidade do Algarve. Atualmente é membro integrado no Centro de Investigação MED - Instituto Mediterrâneo para a Agricultura, Ambiente e Desenvolvimento (Polo UAlG) e do Laboratório Associado CHANGE-Instituto para as Alterações Globais e Sustentabilidade. A sua área de interesse é a aplicação de tecnologias emergentes na conservação de alimentos, nomeadamente no desenvolvimento de novos sistemas de embalagens biodegradáveis e na aplicação de novas tecnologias no processamento de alimentos e extração de compostos bioativos de alimentos de

plantas de origem mediterrânea.

[rcruz@ualg.pt](mailto:rcruz@ualg.pt)

ORCID.org/0000-0002-0839-1881

&gt;

**Sara Raposo**

Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade do Algarve.

Centro de Investigação Marinha e Ambiental.

Professora Auxiliar na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade do Algarve. Diretora do Centro de Investigação Marinha e Ambiental (CIMA) e do Laboratório de Engenharia e Biotecnologia Ambiental (LEBA) da Universidade do Algarve. Membro do Laboratório Associado ARNET - Rede de Investigação Aquática e do Laboratório Colaborativo S2AQUA. A investigação atual é focada na valorização de resíduos ambientais e agroindustriais utilizando recursos biológicos, de forma sustentável. De momento, com o foco para o crescimento de microalgas utilizando águas residuais, facilitando os processos de mitigação/remoção de poluentes emergentes como fármacos, nano e microplásticos. A valorização da biomassa algal produzida está direcionada na obtenção de produtos de valor acrescentado como ácidos gordos, pigmentos, biocombustíveis ou bioplásticos.

[sraposo@ualg.pt](mailto:sraposo@ualg.pt)

ORCID.org/0000-0001-5344-7349

# Branca Edmée Marques, Primeira Catedrática de Ciências em Portugal - Apontamento Genealógico

>  
Raquel Gonçalves-Maia

**Branca Edmée Marques, First Full Professor of Sciences in Portugal – Genealogical Note.** *The core of this article is dedicated to the study of the family of Branca Edmée Marques, the first Full Professor of Sciences at a Portuguese University. Reliable archival collection has allowed us to establish her family tree up to the 4<sup>th</sup> ancestral generation. The dominant influence of the family's social, cultural and humanistic history, mainly that of her mother and her maternal grandmother, on the character of Professor Branca is highlighted. We also briefly present her student career, her stay at the Institut du Radium in Paris, and the foundation of the Radiochemistry Laboratory, later called Center of Radiochemistry Studies of the Faculty of Sciences of the University of Lisbon.*

*O cerne deste artigo é dedicado ao estudo da família de Branca Edmée Marques, a primeira Professora Catedrática de Ciências numa Universidade portuguesa. Uma recolha arquivística fidedigna permitiu estabelecer a sua árvore genealógica até à 4.<sup>a</sup> geração ancestral. Salienta-se a influência dominante da história social, cultural e humanística, principalmente de sua mãe e de sua avó materna, na ténpera da Professora Branca. Apresentamos ainda, resumidamente, o seu percurso estudantil, a estadia no Institut du Radium em Paris e a fundação do Laboratório de Radioquímica, depois Centro de Estudos de Radioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade Lisboa.*

## 1. Introdução

Para quem franqueou as portas da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa em 1965, como eu, e desceu os degraus do Anfiteatro de Química a fim de assistir à primeira aula de Química Inorgânica, a primeira aula na universidade, tudo era a consequência lógica e natural da vida académica... e, no entanto, tudo era profundamente singular, extraordinário. Uma professora, uma mulher com a sua bata branca, Branca se chamava, falou de átomos, das partículas que os compunham, das emanações que a sua composição determinava. Branca Edmée Marques (de Sousa Torres) preparava então novas provas que a fariam ascender ao posto de Professora Catedrática, a categoria mais elevada da carreira docente universitária.

Branca Edmée Marques nasceu em Lisboa no dia 14 de abril de 1899. Em 1966, sagrou-se a primeira mulher catedrática numa escola de Ciências em Portugal (Figura 1).

Figura 1 - Branca Edmée Marques.



## 2. Um percurso extraordinário

É conhecido o percurso estudantil de Branca Edmée Marques: o ensino primário no Colégio Luso-Brasileiro (Travessa das Terras de Santana), o ensino secundário do 1.º ao 5.º ano no Liceu Maria Pia (atual ES Maria Amália Vaz de Carvalho; Rua Rodrigo da Fonseca) e os 6.º e 7.º anos no Liceu Pedro Nunes (ES Pedro Nunes;

Av. Álvares Cabral), sempre em Lisboa. Depois, na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (Rua da Escola Politécnica), concluiu a licenciatura em Ciências Físico-Químicas em 1926, com elevada classificação.

Mais conhecido ficou ainda o seu percurso de investigadora e professora universitária e o seu carisma e determinação inigualáveis, através de vários estudos e divulgação que lhe têm sido justamente dedicados. Por ordem cronológica, cito alguns que, por sua vez, outros citam: O artigo “Branca Edmée Marques (1899-1986)” em “Memórias de Professores Cientistas”, por Maria Alzira Almoester Ferreira [1]; a entrevista “Branca Edmée Marques (1899-1986). Primeira Catedrática de Ciências”, em “Feminino ao Sul”, por Ana Luísa Janeira [2]; a dissertação de mestrado “A investigação em Química no Portugal dos anos trinta do Séc. XX - o estudo de caso da Professora Doutora Branca Edmée Marques”, por Maria Margarida Heliodoro [3]; a biografia “Branca Edmée Marques” (*database*), por Maria da Conceição Ruivo e Mateja Filipović-Sandalj [4]; o artigo “Mme Curie e Mme Marques: o encontro de duas pioneiras”, por Maria da Conceição Ruivo [5]; o artigo “A teimosia de Branca que levou à Marie Curie”, em “Estas mulheres cientistas desafiaram o seu tempo a partir de Lisboa. A história de Carolina, Mathilde e Branca”, por Ana da Cunha e Inês Leote [6]; e o artigo “Branca Edmée Marques. A discípula de Madame Curie” em “55 Mulheres Portuguesas que fizeram História”, por Rosa Ruela [7].

Neste contexto, apraz-nos salientar o estudo desenvolvido por Maria Margarida Heliodoro [3], sob a orientação de Augusto Fitas, onde se relatam com pormenor as tentativas frustradas de obtenção de uma bolsa para internacionalização (estágios em França e Reino Unido) de Branca Edmée Marques e a atividade que, finalmente, veio a poder desenvolver no *Institut du Radium*, o famoso laboratório de Marie Curie. Aí se especializou na química dos elementos radioativos, de um ponto de vista teórico, mas também nos tratamentos químicos e métodos de doseamento. O seu estágio, iniciado em 1931 por oito meses, veio a prolongar-se, sucessivamente, até finais de 1935. Várias notas científicas (artigos) do seu trabalho foram apresentadas na *Académie des Sciences* e publicadas nos *Comptes Rendus*.

A investigação que realizou dará ainda origem a uma tese de doutoramento, sugestão da própria Marie Curie, sob o título “*Nouvelles recherches sur le fractionnement des sels de baryum radifère*”. O júri, composto pelos ilustres cientistas Jean Perrin, André-Louis Debierne e Frédéric Joliot-Curie, reunido em junho de 1935, classificam-na de “*Très Honorable*”, a valorização máxima em França. A Professora Branca obtém assim o grau “*Docteur ès Sciences Physiques*” (*Doctorat d'Etat*). A equiparação ao grau de Doutor

em Ciências Físico-Químicas pelas universidades portuguesas foi-lhe conferida em julho de 1936.

Na mira de Branca Edmée Marques, desde cedo definida, estava a possibilidade de inaugurar em Lisboa um “Instituto Radiológico”.

De regresso à Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa retoma o seu lugar de Assistente e funda o Laboratório de Radioquímica (1938). Mantém correspondência com Paris, participa em congressos, publica artigos; as regências de ensino teórico e prático “a tempo inteiro”, a orientação de estágios e os recursos de espaço e experimentais não lhe permitem uma intensa investigação científica. Mas o seu exemplo dará frutos.

O Instituto para a Alta Cultura (1952-1976), organismo responsável pela investigação científica em Portugal, cria, em abril de 1953, o Centro de Estudos de Radioquímica (ex-Laboratório de Radioquímica) [3,8], bem equipado, tendo Branca Edmée Marques por diretora científica. Progressivamente, o âmbito das investigações do Centro foi sendo alargado a outros domínios, sempre nas áreas de Física e da Química.

A Professora Branca jubilou-se em 1969, à data exata do seu aniversário, 14 de abril; assim era a lei. Era, então, nossa professora de Química Inorgânica Complementar. Um simples ramo de flores e um cartão, que me couberam entregar e escrever, foram o material da nossa profunda gratidão. O seu exemplo deu frutos.

### 3. Pais e avós

Com o passar dos anos, a mente transborda de episódios de vida, lembranças vão-se enquanto outras se grudam aos sentidos. Curiosidade...

Porquê Branca, porquê Edmée, porquê Marques? Sousa Torres? Sim, sabemos porquê. O seu casamento com o conceituado “naturalista/geólogo”, como gostava de se auto-intitular, António da Silva e Sousa Torres (1876-1958) deu-lhe os últimos apelidos [9]. António Sousa Torres era bacharel em Filosofia Natural pela Universidade do Porto. Depois da sua passagem profissional pelo Liceu Central do Porto (atual ES Rodrigues de Freitas, Praça de Pedro Nunes) e pelas provas que o nomearam assistente provisório da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, exerceu o cargo de naturalista no Museu e Laboratório Mineralógico e Geológico da Universidade do Porto, que tinha sido recentemente criado (1912). A qualidade do seu trabalho, de arquivo e de campo, criou-lhe excelente reputação. Mais tarde, transfere-se para a capital, após concurso público para vaga de naturalista no Museu Mineralógico e Geológico da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (1919), onde desenvolveu um trabalho notável de organização espacial e científica, que só o incêndio de 1978 veio destruir [10,11].



Branca? Terá sido escolha de sua mãe, Berta Rosa Marques. Edmée admitimos que possa ter sido alvitado por seu pai, o cidadão francês Alexandre Théodore Roux. O apelido Marques advém da família do seu avô materno, Manuel Justiniano Marques.

É a própria Branca Edmée Marques que, em entrevista a Ana Luísa Janeira, nos diz o nome de seu pai, Alexandre Théodore Roux, e que este falecera ia ela pelos oito anos (de facto, 10 anos) [2]. Não foi um pai presente e, pelo que apurámos, nem o terá sido na sua meninice.

Vindo de Paris nos finais do séc. XIX, com um diploma da *École Beaux-Arts Paris*, foi contratado a fim de conceber e gerir, em conjunto com Luís Bonneville, os “Grandes Armazéns do Chiado”, um espaço comercial de enorme amplitude, moderno, acolhedor e de oferta variada, com o esplendor dos belos armazéns de Paris; foram inaugurados em 1894 [12].

Alexandre Théodore Roux nascera em Paris, em 5 de março de 1854, filho de Jean Roux e de Claudine (Jeanne) Derivet, cujas origens se encontram nos departamentos franceses de Savoie e Côte-d’Or [13–15]. Alexandre Roux tinha dois irmãos e os pais eram artífices na área da pastelaria e panificação.

Sousa Viterbo menciona Alexandre Roux numa memória apresentada à “Academia Real das Ciências de Lisboa”, realçando a “vasta inteligência” e o “respeitável carácter” do “artista pintor-decorador” [16]. Roux casou em Lisboa, em 1903, com uma senhora inglesa de quem tinha uma filha, Aline Jeanne, nascida em 1883 [17]. Veio a falecer em 28 de setembro de 1909 na freguesia das Mercês em Lisboa [18]. Pouco antes de falecer registara a descoberta de uma mina de ferro situada em Asfánil (Rio de Mouro, Sintra). Era seu propósito vir a utilizar os óxidos de ferro hidratados, de tom avermelhado mais ou menos escuro, nas suas pinturas e mesmo explorar o fabrico de pigmentos a nível industrial [19,20], sonho que não concretizou.

Berta Rosa Marques surge como uma figura algo enigmática. A propósito, assim escreveu Ana Luísa Janeira: “Uma mãe que foi capaz de ir para Paris, ficar o dia todo sozinha, vocês imaginam o que seria uma pessoa com dificuldades de comunicação, retirada do seu contexto português, e tudo para que a filha se doutorasse?” [2]. Branca Edmée Marques casara em 1926 [9]. Seu marido, António Sousa Torres, apoia desde sempre o desejo de valorização científica da mulher; mas o olhar social dos tempos recomenda-lhe que ela seja acompanhada pela mãe.

Procurámos conhecer melhor as origens familiares de Branca Edmée Marques, em particular por linha feminina. Fizemos uma pesquisa genealógica consistente, utilizando uma metodologia científica rigorosa.

A veracidade das informações que aqui transmitimos apoia-se em fontes totalmente confiáveis,

documentação fidedigna, por filiação oficialmente reconhecida. O Arquivo Nacional Torre do Tombo foi precioso, em particular os Registos Paroquiais portugueses para genealogia (tombo.pt) e a Rede Portuguesa de Arquivos CRAV (Consulta Real em Ambiente Virtual; crav.arquivos.pt), assim como os *France Archives* (francearchives.gouv.fr) e os *Archives de Paris* (archives.paris.fr), os *Archives départementales de la Savoie* e os *Archives départementales de la Côte d’Or* (patrimoine.savoie.fr/web/dsp\_6165/accueil), em particular os *Actes d’état civil* e os *Registres matricules du Recrutement*.

A genealogia identifica as nossas ligações biológicas, estabelece a nossa rede familiar; e, vai mais longe, indicia a nossa história social, cultural, humanística.

Na Figura 2 identificam-se os antepassados de Branca Edmée Marques até à 4.ª geração. Em cada parcela da árvore genealógica encontram-se os nomes de pais e filho/filha ascendente/descendente, assim como lugar e freguesia de casamento/vivência em comum e data de nascimento, em Portugal; nos registos em França refere-se, em paralelo, a comuna e o departamento.

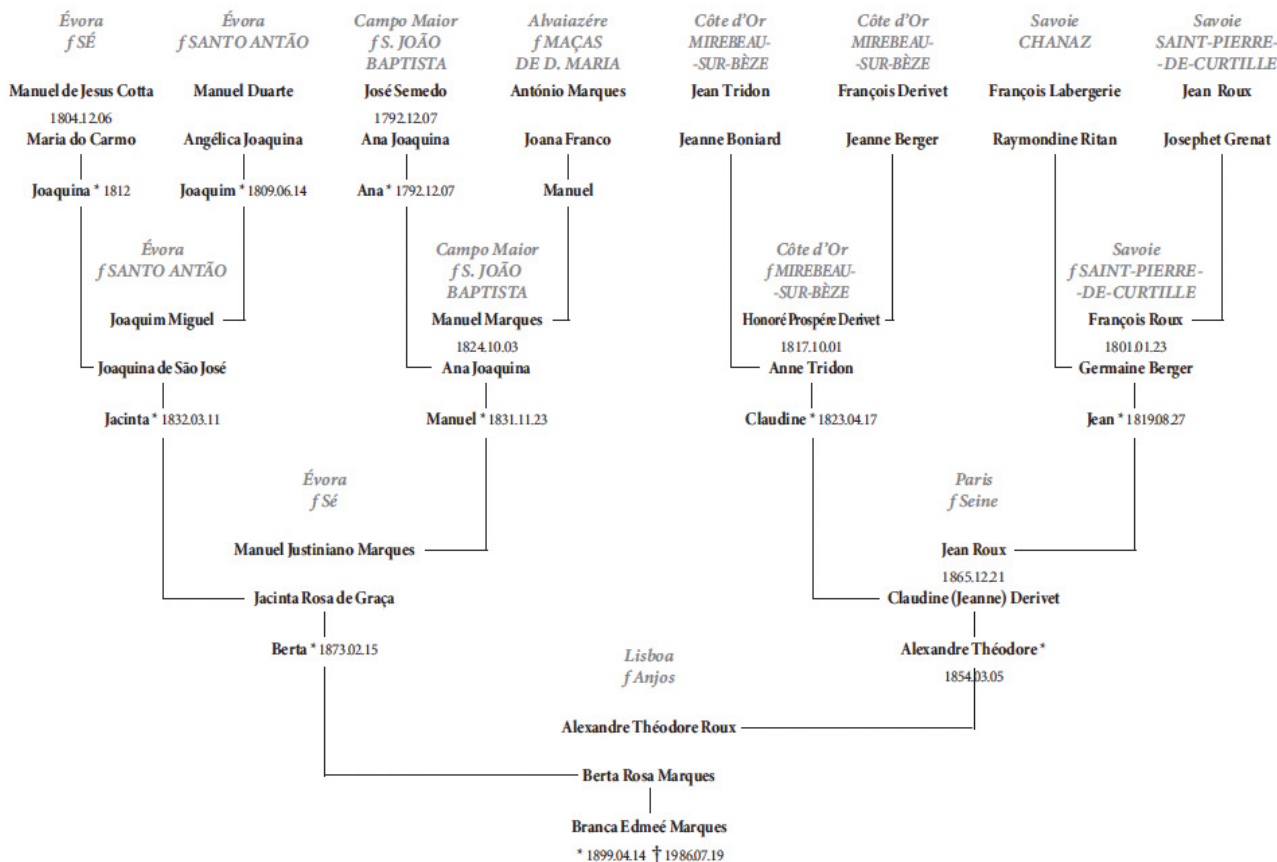
Berta Rosa Marques nasceu em 15 de fevereiro de 1873 em Évora; foi batizada dias depois na paroquial Igreja da Santa Sé pelo Padre Jacinto José Marques, tendo por padrinhos João José da Fonseca e Costa (bacharel em Direito) e sua irmã D. Maria Amália [21]. O assento de perfilhação por sua mãe, Jacinta Rosa da Graça, natural de Évora, na dita Igreja da Santa Sé, vai acontecer mais de sete anos volvidos, em 10 de novembro de 1880 [22]. O reconhecimento de sua filha tivera lugar em escritura pública lavrada no outubro anterior; o pai permanece incógnito.

Uma leitura atenta do registo de batizado de Branca (Edmée Marques), ocorrido em 30 de setembro de 1907, mais de oito anos após o seu nascimento, na Igreja Paroquial dos Anjos, indica ser seu avô materno Manuel Justiniano Marques [23]. No assento imediato pode ler-se sobre o batizado de seu irmão Jorge (Hugo Marques), nascido em 5 de agosto de 1900, com idênticas características.

Manuel Justiniano Marques, natural de Campo Maior, nasceu em 23 de novembro de 1831 [24]. Foi ordenado presbítero em 1854, com uma dispensa de 13 meses de idade, na Capela do Paço de Évora [25]. A sua ocupação paroquial, iniciada em janeiro de 1852, estendeu-se até fevereiro de 1873 (em conjugação com a data do nascimento de Berta), sempre no conselho de Évora [26]. Em 1884 elabora um Testamento Cerrado que será aberto aquando da sua morte, ocorrida em 9 de agosto de 1888 [27].

Tivemos acesso a todos os documentos que citamos, incluindo o Testamento Cerrado do Padre Manuel Justiniano Marques, um verdadeiro símbolo

Figura 2 - Árvore Genealógica de Branca Edmée Marques até à sua 4.ª geração ancestral.



de postura moral e dignidade. Sua filha Berta Rosa Marques e, em menor grau, sua mãe Jacinta Rosa da Graça, que com ele coabitavam, serão suas herdeiras. Um processo judicial complexo e penoso, uma vez que Berta era menor, tinha 15 anos, obrigam a um conselho de família e ao reconhecimento de Jacinta Rosa da Graça “cabeça de casal” [28]. Em 1890, mãe e filha trocam Évora por Lisboa.

Não conseguimos definir exaustivamente o seu percurso na capital. Sabemos, porém, por documentação assinada, que residiam na Rua das Chagas (Freguesia de S. Paulo) em 1894 e na Rua da Penha de França (Freguesia dos Anjos) em 1907. Mais tarde, Berta e os seus filhos, Branca e Jorge, ter-se-ão mudado para residência na zona de Campolide/Campo de Ourique/Estrela.

Quando Branca Edmée Marques manda construir o túmulo que detém o seu nome, no Cemitério dos Prazeres (Figura 3), nele incluiu os restos mortais de sua avó Jacinta Rosa da Graça (óbito em 1918), de sua mãe Berta Rosa Marques (óbito em 1950) e de seu irmão Jorge Hugo Marques, tão precocemente falecido (óbito em 1921). Sem descendência, Branca Edmée Marques doou o túmulo à Santa Casa da Misericórdia, *ad aeternum*, em 1980.

#### 4. O Perfil

Neste apontamento genealógico que efetuámos sobre Branca Edmée Marques ressaltam as figuras femininas da mãe e da avó materna. A vivência de ambas em ambiente, ao tempo, pouco propício ao seu estatuto social, a procura de caminhos alternativos que empreenderam, a vinda para a capital, mais progressista e informal, a elevação pela cultura, os estudos primário, secundário e superior, independentemente do género, terão produzido uma jovem Branca forte, decidida, com previsão de futuro.

Figura 3 - Túmulo de Branca Edmée Marques (pormenores). Cemitério dos Prazeres, Lisboa.



Branca Edmée Marques era uma mulher calma e austera, contida e metódica, de porte reto; afável no trato e de ajuda pronta. Ensinava de forma disciplinada e sistemática, quer se tratasse da forma de pousar as rolhas dos frascos na banca do laboratório, quer na descrição das propriedades dos elementos da Tabela Periódica. Os alunos deveriam vestir a preceito, a instituição tal o justificava e merecia. Professora, alunos e alunas e universidade, todos eram, a seu ver, peças de um desejável progresso.

Após a jubilação, Branca Edmée Marques continuou a sua atividade de investigação no Centro de Química-Física e Radioquímica, que sucedeu ao Centro de Estudos de Radioquímica e englobou novas

unidades de pesquisa. Enviuvara em 1958. Os investigadores, assistentes e técnicos, que laboriosamente desbravavam a Ciência no seu grupo de trabalho, sempre foram família sua.

Diariamente, trocávamos o nosso bom-dia: “Bom-dia, Professora Branca”, “Bom-dia, minha rica”.

### Agradecimentos

A autora muito agradece a José Bernardo Maia pela mestria da composição da Figura 2; igualmente agradece aos funcionários da Secretaria do Cemitério dos Prazeres, em Lisboa, pela amabilidade e profissionalismo com que atenderam os nossos pedidos.

### Referências

- [1] M. A. A. M. Ferreira, “Branca Edmée Marques (1899-1986)”, em “Memórias de Professores Cientistas, Coord. cient. A. Simões, pg. 51-57, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa 1911-2001, 2001; M. A. A. M. Ferreira, “Torres, Branca Edmée Marques de Sousa – Uma Pioneira da Ciência”. [web.archive.org/web/20180119120106/http://memoria.ul.pt/index.php/Torres,\\_Branca\\_Edm%C3%A9e\\_Marques\\_de\\_Sousa](http://web.archive.org/web/20180119120106/http://memoria.ul.pt/index.php/Torres,_Branca_Edm%C3%A9e_Marques_de_Sousa).
- [2] A. L. Janeira, “Branca Edmée Marques (1899-1986). Primeira Catedrática de Ciências (Entrevista)”, em “Feminino ao Sul. História e Historiografia da Mulher”, Coord. S. M. Pereira, M. D. Manso e M. Favinha, pg. 75-122, Livros Horizonte, 2008.
- [3] M. M. N. Heliodoro, “A investigação em Química no Portugal dos anos trinta do Séc. XX – o estudo de caso da Professora Doutora Branca Edmée Marques”, dissertação de Mestrado em Química em Contexto Escolar, Escola de Ciências e Tecnologia, Universidade de Évora, 2012. [hdl.handle.net/10174/15821](http://hdl.handle.net/10174/15821).
- [4] M. C. Ruivo, M. Filipović-Sandalj, “Branca Edmée Marques” (biografia), em “*She Thought it: Crossing Bodies in Sciences and Art*” (database), Faculdade de Letras da Universidade do Porto, 2019. [shethoughtit.ilcm.com/biography/branca-edmee-marques](http://shethoughtit.ilcm.com/biography/branca-edmee-marques).
- [5] M. C. Ruivo, *Gazeta de Física* 2021, 43, 14-18. [spf.pt/magazines/GFIS/480/pdf](http://spf.pt/magazines/GFIS/480/pdf).
- [6] A. Cunha, I. Leote, “A teimosia de Branca que levou à Marie Curie”, em “Estas mulheres cientistas desafiaram o seu tempo a partir de Lisboa. A história de Carolina, Mathilde e Branca”, Mensagem de Lisboa, 2023. [amensagem.pt/2023/03/07/mulheres-desafiaram-tempo-lisboa-ciencia-carolina-mathilde-branca](http://amensagem.pt/2023/03/07/mulheres-desafiaram-tempo-lisboa-ciencia-carolina-mathilde-branca).
- [7] R. Ruela, “Branca Edmée Marques. A discípula de Madame Curie” em “55 Mulheres Portuguesas que fizeram História”, *Visão História* 2023, 75, 46-47.
- [8] Memória do CTN. [ctn.tecnico.ulisboa.pt/memoria/1951-60.htm](http://ctn.tecnico.ulisboa.pt/memoria/1951-60.htm).
- [9] António da Silva e Sousa Torres e Branca Edmée Marques casaram civilmente na 3.ª Conservatória de Lisboa em 23 de dezembro de 1926 (averbamento ao registo de batismo de Branca Edmée Marques).
- [10] C. F. T. Assunção, “Dr. António da Silva e Sousa Torres (1876 -1958)”. *Boletim do Museu Mineralógico e Geológico da Universidade de Lisboa* 1958, 26, 281-283.
- [11] J. M. Brandão, V. F. Santos, “Torres, António da Silva e Sousa”, *Dicionário Quem é Quem na Museologia Portuguesa*, pg. 312-314, Coord. M. F. Ferreira, J. O. Monteiro, R. H. Silva, IHA/NOVA FCSH. [research.unl.pt/ws/portalfiles/portal/13106923/dicionario\\_quemquem\\_312\\_314.pdf](http://research.unl.pt/ws/portalfiles/portal/13106923/dicionario_quemquem_312_314.pdf).
- [12] “Remonta ao século passado essa legenda alfacinha, adotada em 1894 pela Companhia dos Grandes Armazéns do Chiado, que em 20 de novembro se estabeleceu com o capital de cem contos de réis, por iniciativa de Luís Bonneville e Emile Philipot. A gerência coube ao primeiro e a Alexandre Roux, que delegaram em A. Philipot as funções de primeiro empregado.” M. Costa, “O Palácio Barcelinhos e o seu antecessor, o Convento do Espírito Santo da Pedreira”, em “Olisipo”, *Amigos de Lisboa* 1960, 89, 37-46. [hemerotecadigital.cm-lisboa.pt/periodicos/olisipo/1960/N89/N89\\_master/Olisipo\\_N89\\_Jan1960.PDF](http://hemerotecadigital.cm-lisboa.pt/periodicos/olisipo/1960/N89/N89_master/Olisipo_N89_Jan1960.PDF).
- [13] Roux, Alexandre Théodore, Paris Archives, Acte de Naissance, Prefecture du Département de la Seine, 3ème Arrondissement, 5 Mars 1854.
- [14] Roux et Derivet, Paris Archives, Acte de mariage, 18ème Arrondissement, 1101, 21 Decembre 1865; *Reconnaissance et légitimation de ... Alexandre Théodore né à Paris troisième arrondissement le cinq mars mil huit cent cinquante quatre...*
- [15] Roux, Alexandre Théodore, Paris Archives, Recrutement militaire de la Seine, 1874, Matricule 567 e Matricule 2531, classe de mobilization: 1874.
- [16] Sousa Viterbo, “Notícia de Alguns Pintores Portuguezes e de outros que, sendo estrangeiros, exerceram a sua arte em Portugal”, 3.ª Série, pg. 152, Academia Real das Sciencias, Lisboa, 1911. [resources.warburg.sas.ac.uk/pdf/clh1500b2915060.pdf](http://resources.warburg.sas.ac.uk/pdf/clh1500b2915060.pdf).
- [17] Alexandre Roux e Mary Ann Payne, Freguesia de Charneca, Lisboa, Registos de casamentos, N.º 1, 17 de março de 1903. [digitarq.arquivos.pt/viewer?id=5654345](http://digitarq.arquivos.pt/viewer?id=5654345).
- [18] Alexandre Theodore Roux, Freguesia das Mercês, Lisboa, Registos de óbitos, N.º 149, 28 de setembro de 1909. [digitarq.arquivos.pt/viewer?id=5932592](http://digitarq.arquivos.pt/viewer?id=5932592).
- [19] J. E. C. Moura, J. L. S. Carvalho, “Catálogo das Minas de Ferro do Continente”, ed. Direção Geral de Minas e Serviços Geológicos, Tomo 2 (1952). Concessão de mineração N.º 552, registado em 17/05/1912.
- [20] Diário da República, N.º 40, 17 de fevereiro de 1912; passagem de direito do descobridor legal da mina de ferro de Asfamil. [files.diariodarepublica.pt/1s/1912/02/04000/06600660.pdf](http://files.diariodarepublica.pt/1s/1912/02/04000/06600660.pdf).
- [21] Berta, Freguesia da Sé, Évora, Registos de batismos, N.º 71, 2 de março de 1873. [digitarq.adevr.arquivos.pt/viewer?id=1001002](http://digitarq.adevr.arquivos.pt/viewer?id=1001002).
- [22] Berta, Freguesia da Sé, Évora, Registos de legitimação e reconhecimento, N.º 2, 10 de novembro de 1880. [digitarq.adevr.arquivos.pt/viewer?id=1001203](http://digitarq.adevr.arquivos.pt/viewer?id=1001203).
- [23] Branca, Freguesia dos Anjos, Lisboa, Registos de batismos, N.º 446, 30 de setembro de 1907. [digitarq.arquivos.pt/viewer?id=5933042](http://digitarq.arquivos.pt/viewer?id=5933042).
- [24] Manuel, Freguesia de São João Batista, Campo Maior, Registos de batismos, pg. 191 vs. (1.º), 29 de novembro de 1831. [digitarq.adptg.arquivos.pt/viewer?id=1045985](http://digitarq.adptg.arquivos.pt/viewer?id=1045985).
- [25] Arquivo Distrital de Évora, Suplemento de idade para se poder ordenar Manuel Justiniano Marques, 20 de fevereiro de 1854. Código de referência: PT/ADEV/FE/DIO-CEEV/A/015/00081.
- [26] Ocupação Paroquial, Manuel Justiniano Marques, CEHR – O Clero Secular. [portal.cehr.ft.lisboa.ucp.pt/CleroSecular/index.php/RPCC/resultados/5590](http://portal.cehr.ft.lisboa.ucp.pt/CleroSecular/index.php/RPCC/resultados/5590).
- [27] Arquivo Distrital de Évora, Testamento Cerrado do Padre Manuel Justiniano Marques, 7 de dezembro de 1894. Código de referência: PT/ADEV/AL/ACEV/004/00034/00034.
- [28] Arquivo Distrital de Évora, Auto de juramento da cabeça de casal, em “Processo de inventário orfanológico por óbito de Manuel Justiniano Marques”, 27 de agosto de 1888”. Código de referência: PT/ADEV/JUD/TCEV/A/001/01110.

>

#### Raquel Gonçalves-Maia

Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (Ciências ULisboa). Professora Catedrática aposentada da FCUL. Desenvolveu atividade de investigação na área da Química-Física, Cinética e Termodinâmica. Dirigiu o Boletim da Sociedade Portuguesa de Química. Foi representante nacional na *Commission on Chemical Kinetics*

da IUPAC. Foi colaboradora regular do “JL – *Jornal de Letras, Artes e Ideias*”. É membro do PEN Clube Português. A Química, a História e a Filosofia das Ciências e a Literatura suscitaram o seu interesse. Tem centenas de artigos e algumas dezenas de livros, contos e romances publicados em Portugal e no Brasil. [rmmgnc@gmail.com](mailto:rmmgnc@gmail.com)  
ORCID.org/0000-0002-0543-8752

# O Que Há de Novo no CLP?

## Novas Classes e Categorias de Perigo Introduzidos pelo Regulamento Delegado

>  
Cristina Galacho

**What's New in CLP? New Hazard Classes and Categories Introduced by Delegated Regulation.** *On 31<sup>st</sup> March 2023, the Official Journal of the European Union published Commission Delegated Regulation (EU) 2023/707, which amends Regulation (EC) No 1272/2008 regarding hazard classes and the criteria for the classification, labelling, and packaging of substances and mixtures. This regulation introduces new hazard classes and categories, specifically Endocrine Disruptor for Human Health (ED HH) categories 1 and 2, Endocrine Disruptor for the Environment (ED ENV) categories 1 and 2, Persistent, bioaccumulative and toxic (PBT) or very Persistent and very bioaccumulative (vPvB), and Persistent, mobile and toxic (PMT) or very persistent and very mobile (vPvM), as well as criteria for the classification, labelling, and packaging of substances and mixtures. This article provides an overview of the Delegated Regulation, covering the background, scope, new hazard classes and categories, main changes in hazard communication, and implementation dates.*

*Em 31/03/2023 foi publicado no Jornal Oficial da União Europeia o Regulamento Delegado (UE) 2023/707 da Comissão Europeia que altera o Regulamento (CE) n.º 1272/2008 no respeitante às classes de perigo e aos critérios de classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas. Este regulamento introduz novas classes e categorias de perigo, nomeadamente, Desregulador endócrino para a saúde humana (ED HH) categorias 1 e 2, Desregulador endócrino para o ambiente (ED ENV) categorias 1 e 2, Persistente, bioacumulável e tóxico (PBT) ou muito persistente, e muito bioacumulável (mPmB), e, Persistente, móvel e tóxico (PMT) ou muito persistente e muito móvel (mPmM), e critérios para a classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas. Neste artigo apresenta-se uma panorâmica geral sobre o regulamento Delegado, sendo abordados os antecedentes, o âmbito de aplicação, as novas classes e categorias de perigo, as principais alterações na comunicação dos perigos e as datas de implementação.*

### Historial

A classificação e rotulagem de produtos químicos, mais concretamente de substâncias e misturas, têm evoluído significativamente ao longo das últimas décadas, com os objetivos de garantir um elevado nível de proteção da saúde humana e do ambiente, assim como a sua livre circulação [1,2].

A decisão do desenvolvimento de um Sistema Globalmente Harmonizado, sob a égide da Organização das Nações Unidas (ONU), foi tomada a nível internacional, na Conferência das Nações Unidas para o Meio Ambiente e Desenvolvimento, realizada no Rio de Janeiro em 1992 [1]. Após uma década de intenso trabalho, o Sistema Mundial Harmonizado de

Classificação e Rotulagem de Produtos Químicos, GHS (do inglês, *Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals*), foi adotado pelo Conselho Económico e Social das Nações Unidas, em 2002, e publicado em 2003, no denominado *Purple Book*. Desde então o GHS tem sido revisto e atualizado bianualmente, encontrando-se vigente a versão 10 de 2023 [1-3]. Contudo, o GHS é um acordo internacional não vinculativo, constituído por um conjunto de recomendações internacionais, implicando que a sua aplicação possa ser opcional [1].

A União Europeia, que através dos Estados Membros e da Comissão Europeia participou no seu desenvolvi-

mento, tal como a grande maioria dos países, pretendeu torná-lo obrigatório e implementou-o na legislação comunitária sob a forma do Regulamento (CE) n.º 1272/2008, conhecido como Regulamento CLP (do inglês, *Classification, Labelling, and Packaging*) [1,4].

A partir de 1 de junho de 2017, e após várias fases de implementação, o Regulamento CLP passou a ser a única legislação aplicável nos Estados-Membros da União Europeia para a classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas. Este Regulamento define, entre outros, critérios harmonizados para a classificação de substâncias, misturas e determinados artigos em classes de perigo e nas subdivisões dessas classes de perigo e estabelece disposições quanto à forma como esses critérios devem ser preenchidos, bem como os correspondentes requisitos de rotulagem [5].

Em 31 de março de 2023 a Comissão Europeia publicou, no Jornal Oficial da União Europeia, o Regulamento Delegado (UE) 2023/707 que altera o Regulamento CLP [6]. As atualizações introduzidas surgem, após consulta pública aberta, em resposta à proposta de revisão do Regulamento CLP motivada, entre outros fatores:

- pelo Pacto Ecológico Europeu, que estabelece o objetivo de proteger melhor a saúde humana e o ambiente, no contexto de uma abordagem ambiciosa para combater a poluição proveniente de todas as fontes e avançar para um ambiente livre de substâncias tóxicas [6];

- pela necessidade de estabelecer uma identificação juridicamente vinculativa dos perigos inerentes aos desreguladores endócrinos, com base na definição estabelecida pela Organização Mundial da Saúde em 2002 e em critérios já desenvolvidos para os produtos fitofarmacêuticos e produtos biocidas, e de a aplicar em toda a legislação da União. Saliente-se a Comunicação da Comissão intitulada «Estratégia para a sustentabilidade dos produtos químicos rumo a um ambiente sem substâncias tóxicas» que apontou igualmente para a necessidade de incluir novas classes e critérios de perigo no Regulamento CLP a fim de abordar plenamente a toxicidade, a persistência, a mobilidade e a bioacumulação no ambiente [6];

- pelo progresso científico e tecnológico e evolução dos mercados [6,7].

### O que é?

Tal como foi anteriormente referido, o Regulamento Delegado, cujo frontispício se apresenta na Figura 1, é o Regulamento (UE) 2023/707 da Comissão de 19 de

dezembro de 2022 que altera o Regulamento (CE) n.º 1272/2008 no respeitante às classes de perigo e aos critérios de classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas. O Regulamento Delegado é uma atualização importante do Regulamento CLP e introduz novos critérios para a classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas, incluindo novas classes de perigo e categorias de perigo [5,6].

### Âmbito de Aplicação

O Regulamento Delegado aplica-se a todas as substâncias e misturas químicas colocadas no mercado da UE ao abrigo do Regulamento REACH (do inglês *Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals*). Aplica-se igualmente às substâncias ativas contidas nos produtos biocidas e nos produtos fitofarmacêuticos, que são normalmente consideradas prioritárias para efeitos de classificação harmonizada na UE [5,6].

Esta legislação da UE é vinculativa para os fabricantes, os importadores, os utilizadores a jusante e os distribuidores que colocam substâncias no mercado da União Europeia. Os Estados-Membros também farão referência às novas classes e critérios de perigo quando apresentarem propostas de classificação e rotulagem harmonizadas [5,6].

### Novas Classes, Categorias e Advertências de Perigo

O Regulamento Delegado estabelece novos critérios de classificação de substâncias e misturas, em aditamento ao CLP, e introduz quatro novas classes de perigo para a classificação das mesmas, que em seguida se apresentam [6,7]:

- Desregulador endócrino para a saúde humana (ED HH).
- Desregulador endócrino para o ambiente (ED ENV).
- Persistente, bioacumulável e tóxico (PBT) ou muito persistente e muito bioacumulável (mPmB).
- Persistente, móvel e tóxico (PMT) ou muito persistente e muito móvel (mPmM).

Para efeitos de classificação de desregulação endócrina na saúde humana e no ambiente, as substâncias devem ainda ser classificadas numa das seguintes categorias de perigo [6]:

- Categoria 1: Desreguladores endócrinos para a saúde humana/ambiente conhecidos ou supostos.
- Categoria 2: Desreguladores endócrinos suspeitos para a saúde humana/ambiente.

#### REGULAMENTO DELEGADO (UE) 2023/707 DA COMISSÃO de 19 de dezembro de 2022

que altera o Regulamento (CE) n.º 1272/2008 no respeitante às classes de perigo e aos critérios de classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas

Figura 1 - Frontispício do Regulamento Delegado da (UE) 2023/707, versão portuguesa.

A classificação das misturas deve ser efetuada de forma diferenciada caso haja dados para todos os componentes ou apenas para alguns componentes da mistura (princípios de extrapolação), tendo em consideração os limites de concentração genéricos dos componentes classificados como desreguladores endócrinos para a saúde/ambiente.

A introdução das novas classes de perigo implicou a inserção de oito novas advertências de perigo (advertências de perigo UE), que devem funcionar como «advertências H» (advertências de perigo «principais»). Refira-se que se forem atribuídas as advertências de perigo EUH441 (acumula-se fortemente no ambiente e nos organismos vivos, incluindo no ser humano) ou a EUH451 (pode causar uma contaminação muito prolongada e difusa dos recursos hídricos) podem ser omitidas, respetivamente, as advertências EUH440 (acumula-se no ambiente e nos organismos vivos, incluindo no ser humano) e a EUH450 (pode causar uma contaminação prolongada e difusa dos recursos hídricos) [5,6].

Na tabela 1 apresentam-se os códigos das novas classes e categorias de perigo, assim como os códigos das advertências de perigo e respetivos significados [5,6].

Tabela 1 - Códigos das classes e categorias de perigo e códigos das advertências de perigo e respetivos significados.

| Código da classe e categoria de perigo | Código da advertência de perigo | Advertência de perigo  |
|--|---------------------------------|--|
| ED HH 1                                | EUH380                          | Pode causar desregulação endócrina nos seres humanos.                              |
| ED HH 2                                | EUH381                          | Suspeito de causar desregulação endócrina nos seres humanos.                       |
| ED ENV 1                               | EUH430                          | Pode causar desregulação endócrina no ambiente.                                    |
| ED ENV 2                               | EUH431                          | Suspeito de causar desregulação endócrina no ambiente.                             |
| PBT                                    | EUH440                          | Acumula-se no ambiente e nos organismos vivos, incluindo no ser humano.            |
| mPmB                                   | EUH441                          | Acumula-se fortemente no ambiente e nos organismos vivos, incluindo no ser humano. |
| PMT                                    | EUH450                          | Pode causar uma contaminação prolongada e difusa dos recursos hídricos.            |
| mPmM                                   | EUH451                          | Pode causar uma contaminação muito prolongada e difusa dos recursos hídricos.      |

### Comunicação dos Perigos

O Regulamento Delegado estabelece os elementos do rótulo que devem ser usados para a comunicação dos perigos relativos às novas classes e categorias e categorias introduzidas, nomeadamente, palavra-sinal, advertências de perigo e recomendações de prudência. Relativamente aos pictogramas, define que estes devem

ser acrescentados às informações sobre os perigos das novas classes de perigo, quando estas forem adotadas no GHS, a fim de evitar interferências com a utilização dos pictogramas existentes, que abrangem os perigos atuais. Caso sejam criados pictogramas para as novas classes de perigo, devem começar por ser objeto de concertação no GHS, para que possam ser aplicados por todos os seus membros [6].

Nas tabelas 2-5 apresentam-se os elementos do rótulo para as substâncias ou misturas que preenchem os critérios de classificação de desregulação endócrina para a saúde humana, desregulação endócrina para o ambiente, propriedades PBT e mPmB e propriedades PMT e mPmM, respetivamente [6].

Tabela 2 - Elementos do rótulo aplicáveis à desregulação endócrina para a saúde humana.

| Classificação                                    | Categoria 1   | Categoria 2  |
|--|---|--|
| <b>Símbolo/pictograma</b>                        | -   | -  |
| <b>Palavra-sinal</b>                             | Perigo  | Atenção  |
| <b>Advertência de perigo</b>                     | EUH380: Pode causar desregulação endócrina nos seres humanos. | EUH381: Suspeito de causar desregulação endócrina nos seres humanos. |
| <b>Recomendação de prudência — Prevenção</b>     | P201<br>P202<br>P263<br>P280                                  | P201<br>P202<br>P263<br>P280   |
| <b>Recomendação de prudência — Resposta</b>      | P308 + P313   | P308 + P313  |
| <b>Recomendação de prudência — Armazenamento</b> | P405  | P405   |
| <b>Recomendação de prudência — Eliminação</b>    | P501  | P501   |

Tabela 3 - Elementos do rótulo aplicáveis à desregulação endócrina para o ambiente.

| Classificação                                    | Categoria 1   | Categoria 2  |
|--|---|--|
| <b>Símbolo/pictograma</b>                        | -   | -  |
| <b>Palavra-sinal</b>                             | Perigo  | Atenção  |
| <b>Advertência de perigo</b>                     | EUH430: Pode causar desregulação endócrina no ambiente. | EUH431: Suspeito de causar desregulação endócrina no ambiente. |
| <b>Recomendação de prudência — Prevenção</b>     | P201<br>P202<br>P273                                    | P201<br>P202<br>P273   |
| <b>Recomendação de prudência — Resposta</b>      | P391  | P391   |
| <b>Recomendação de prudência — Armazenamento</b> | P405  | P405   |
| <b>Recomendação de prudência — Eliminação</b>    | P501  | P501   |

Tabela 4 - Elementos do rótulo aplicáveis às propriedades PBT e mPmB.

| Classificação                          | Categoria 1   | Categoria 2  |
|--|---|--|
| Símbolo/<br>pictograma                 | -   | -  |
| Palavra-sinal                          | Perigo  | Perigo   |
| Advertência de perigo                  | EUH440: Acumula-se no ambiente e nos organismos vivos, incluindo no ser humano. | EUH441: Acumula-se fortemente no ambiente e nos organismos vivos, incluindo no ser humano. |
| Recomendação de prudência — Prevenção  | P201<br>P202<br>P273  | P201<br>P202<br>P273   |
| Recomendação de prudência — Resposta   | P391  | P391   |
| Recomendação de prudência — Eliminação | P501  | P501   |

Tabela 5 - Elementos do rótulo aplicáveis às propriedades PMT e mPmM.

| Classificação                          | Categoria 1   | Categoria 2   |
|--|---|---|
| Símbolo/<br>pictograma                 | -   | -   |
| Palavra-sinal                          | Perigo  | Perigo  |
| Advertência de perigo                  | EUH450: Pode causar uma contaminação prolongada e difusa dos recursos hídricos. | EUH451: Pode causar uma contaminação muito prolongada e difusa dos recursos hídricos. |
| Recomendação de prudência — Prevenção  | P201<br>P202<br>P273  | P201<br>P202<br>P273  |
| Recomendação de prudência — Resposta   | P391  | P391  |
| Recomendação de prudência — Eliminação | P501  | P501  |

### Principais alterações introduzidas

O Regulamento CLP é alterado pelo Regulamento Delegado do seguinte modo [4,6,8,9]:

• **Anexo I:** é alterado em conformidade com o anexo I do Regulamento Delegado. Foi alterado para incluir quatro novas classes de perigo e critérios de classificação de substâncias e misturas, incluindo critérios de classificação para desreguladores endócrinos para a saúde humana ou para o ambiente, PBT ou mPmB, PMT ou mPm, e limites de concentração genéricos dos componentes para a classificação de misturas. Adicionalmente, foram introduzidas duas categorias de desreguladores endócrinos com base em evidências científicas, desreguladores endócrinos conhecidos ou supostos (categoria 1) e desreguladores endócrinos suspeitos (categoria 2), tanto para a saúde humana como para o ambiente.

• **Anexo II:** é alterado em conformidade com o

anexo II do Regulamento Delegado. Foi alterado para incluir um novo critério que desencadeia a indicação de perigo “Ficha de Dados de Segurança disponível a pedido” no rótulo de misturas não classificadas como perigosas que contenham uma substância classificada como desregulador endócrino de categoria 2 para a saúde humana ou para o ambiente, num teor igual ou superior a 0,1%.

• **Anexo III:** é alterado em conformidade com o anexo III do Regulamento Delegado. Foi alterado para incluir novas advertências de perigo EUH380, EUH381, EUH430, EUH431, EUH440, EUH441, EUH450 e EUH451.

• **Anexo IV:** é alterado em conformidade com o anexo IV do Regulamento Delegado.

Foi alterado para incluir os códigos das classes de perigo.

### Datas de Implementação

O Regulamento Delegado (UE) 2023/707 foi publicado no Jornal Oficial da União Europeia em 31 de março de 2023 e entrou em vigor no dia seguinte à sua publicação, 1 de abril de 2023. A sua implementação será efetuada de forma faseada pelo que nem todas as disposições serão obrigatórias imediatamente após a sua entrada em vigor. Contudo, existem três datas importantes, relativas à obrigatoriedade de classificação e rotulagem de substâncias e de misturas de acordo com o presente Regulamento, que se apresentam de seguida [5,6]:

- 1 de maio de 2025: Data a partir da qual os fornecedores de substâncias devem classificar e rotular as substâncias de acordo com as novas classes e critérios de perigo estabelecidos pelo Regulamento Delegado;
- 1 de maio de 2026: Data a partir da qual os fornecedores de misturas devem classificar e rotular as misturas de acordo com as novas classes e critérios de perigo estabelecidos pelo Regulamento Delegado;
- 1 de maio de 2028: Data a partir da qual é obrigatório que todas as substâncias e misturas no mercado estejam em conformidade com os novos requisitos de classificação e rotulagem, mesmo aquelas que já estavam no mercado antes das datas de aplicação obrigatória (ou seja, a partir de 1 de maio de 2025 para substâncias e 1 de maio de 2026 para misturas).

### Conclusões

O Regulamento Delegado (UE) 2023/707 representa uma evolução significativa na regulamentação de substâncias e misturas, na União Europeia, refletindo o compromisso da Comissão Europeia com a proteção da saúde humana e do meio ambiente. A introdução das novas classes e categorias de perigo (Desregulador endócrino para a saúde humana (ED HH) categorias

1 e 2, Desregulador endócrino para o ambiente (ED ENV) categorias 1 e 2, Persistente, bioacumulável e tóxico (PBT) ou muito persistente, e muito bioacumulável (mPmB), e, Persistente, móvel e tóxico (PMT) ou muito persistente e muito móvel (mPmT), visa preencher lacunas existentes no Regulamento CLP. Este Regulamento não atualiza apenas os critérios para a classificação e rotulagem de substâncias e misturas, mas também promove uma maior transparência e comunicação dos perigos associados a essas substâncias e misturas, alinhando-se com os objetivos do Pacto Ecológico Europeu e a Estratégia para a Sustentabilidade dos Produtos Químicos.

As novas disposições incluem a implementação de advertências de perigo específicas e a manutenção de pictogramas já existentes para comunicar perigos.

Os períodos de transição definidos até 2028 permitem que fabricantes e fornecedores se adaptem

progressivamente às novas exigências legislativas, garantindo conformidade sem comprometer a continuidade do mercado.

Este novo Regulamento, ao integrar novos conhecimentos científicos e tecnológicos e ao responder a preocupações emergentes sobre substâncias e misturas, fortalece a legislação dos Estados Membros da União Europeia e abre portas a futuras atualizações, a nível global, do Sistema Mundial Harmonizado de Classificação e Rotulagem de Produtos Químicos.

### Agradecimentos

A autora agradece à Fundação para Ciência e a Tecnologia, I. P. o financiamento atribuído ao Laboratório HERCULES – Herança Cultural, Estudos e Salvaguarda (DOI: 10.54499/UIDB/04449/2020) e ao Laboratório Associado IN2PAST (DOI: 10.54499/LA/P/0132/2020).

### Referências

- [1] C. Galacho, *Química* **2015**, 138, 47-56. DOI: 10.52590/M3.P670.A30001991.
- [2] CHEMWATCH: Conselhos sobre novas classes de perigo para substâncias e misturas. [chemwatch.net/pt/blog/advice-on-new-hazard-classes-for-substances-and-mixtures/](http://chemwatch.net/pt/blog/advice-on-new-hazard-classes-for-substances-and-mixtures/) (acedido em 12/06/2024).
- [3] Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS Rev. 10, 2023): [unece.org/transport/dangerous-goods/ghs-rev10-2023](http://unece.org/transport/dangerous-goods/ghs-rev10-2023) (acedido em 12/06/2024).
- [4] CLP Web: Regulamento (CE) n.º 1272/2008 do Parlamento Europeu e do Conselho de 16 de Dezembro de 2008 relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas [eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=Oj:L:2008:353:0001:1355:pt:PDF](http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=Oj:L:2008:353:0001:1355:pt:PDF) (acedido em 26/03/2015).
- [5] European Chemicals Agency. Agência Europeia dos Produtos Químicos: [echa.europa.eu/pt/new-hazard-classes-2023](http://echa.europa.eu/pt/new-hazard-classes-2023) (acedido em 12/06/2024).
- [6] Regulamento Delegado (UE) 2023/707 da Comissão de 19 de dezembro de 2022 que altera o Regulamento (CE) n.º 1272/2008 no respeitante às classes de perigo e aos critérios de classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas: [eur-lex.europa.eu/legal-content/PT/TXT/PDF/?uri=CELEX:32023R0707](http://eur-lex.europa.eu/legal-content/PT/TXT/PDF/?uri=CELEX:32023R0707) (acedido em 12/06/2024).
- [7] ULTRUS Prospector Knowledge Center: New EU CLP hazard classes. [ulprospector.com/knowledge/16298/pe-new-eu-clp-hazard-classes](http://ulprospector.com/knowledge/16298/pe-new-eu-clp-hazard-classes) (acedido em 20/06/2024).
- [8] Hibiscus PLC: EU Publishes New Hazard Classes for Endocrine Disruptors and Persistent and Mobile Chemicals. [hibiscus-plc.co.uk/eu-publishes-new-hazard-classes-for-endocrine-disruptors-and-persistent-and-mobile-chemicals](http://hibiscus-plc.co.uk/eu-publishes-new-hazard-classes-for-endocrine-disruptors-and-persistent-and-mobile-chemicals) (acedido em 12/06/2024).
- [9] Hibiscus PLC: GHS / CLP Minimum Font Sizes for Labels – Labelling Changes Passed Under CLP Regulations. [hibiscus-plc.co.uk/update-to-labelling-changes-proposed-under-clp-regulations](http://hibiscus-plc.co.uk/update-to-labelling-changes-proposed-under-clp-regulations) (acedido em 12/06/2024).

>

#### Cristina Galacho

*Universidade de Évora, Escola de Ciências e Tecnologia. Departamento de Química e Bioquímica.*

É licenciada em Química Tecnológica pela FCUL e Doutorada em Química pela Universidade de Évora (UÉ). É Professora Auxiliar do Departamento de Química da Escola de Ciências e Tecnologia da UÉ e Investigadora do Laboratório HERCULES. É formadora acreditada pelo Conselho Científico-Pedagógico da Formação Contínua (CCPFC) e autora de ações de formação destinadas a Professores do grupo 510.

[pcg@uevora.pt](mailto:pcg@uevora.pt)

CIÊNCIA ID: 5516-15D2-AA6D





## Brilhos Festivos

A *Royal Institution* é uma instituição com mais de 200 anos, e que promove o encontro entre público e cientistas, de modo que todos possam partilhar o seu interesse e paixão pela ciência. Sediada no Museu Faraday em Londres, têm por missão proporcionar um acesso equitativo à ciência, acreditando que o desejo das pessoas de se envolverem com a ciência e os cientistas deve ser facilitado. Deste modo a *Royal Institution* criou espaços para os cientistas e o público explorarem a ciência juntos, ajudando assim as pessoas a descobrirem a ciência e a envolverem-se mais profundamente. A instituição promove diversas atividades, sendo as palestras de Natal (tópico *Christmas Lectures*) um evento emblemático. As diferentes atividades estão gravadas e disponíveis *online*. Nesta época festiva sugerimos assistirem à palestra de Matthew Tosh (tópico *Chemistry*) e ficarem a saber tudo sobre os segredos (químicos) por trás da pirotecnia!



A química na pirotecnia. @Royal Institution.

Veja mais em [rigb.org/explore-science](http://rigb.org/explore-science)

>

**Vasco Bonifácio**

[vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt](mailto:vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt)



Neve artificial. @Ronyes Tech.

Veja mais em [ronyestech.com](http://ronyestech.com)

>

**Vasco Bonifácio**

[vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt](mailto:vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt)



## Experiências Natalícias

Na época do Natal e fim de ano os miúdos estão em casa de férias, e para os manter entretidos e, quem sabe, um pouco afastados do telemóvel, umas experiências de química poderão ser o mote para uma manhã ou tarde diferente. As experiências poderão ser usadas também para falar um pouco sobre a química envolvida e motivar os mais novos para o estudo desta ciência. No *site* da *Ronyes Tech* encontram-se diversas sugestões. Uma delas é muito simples e consiste na produção de neve artificial (tópico *Holiday Science – Christmas Science*). Existem diversas receitas para fazer neve artificial, como por exemplo o uso de fraldas descartáveis, bastando juntar água ao polímero que vem no seu interior. A “neve” produzida poderá depois ser usada para decorar a árvore de Natal lá de casa!

# Combustão e o Natal



O Natal é, sem dúvida, uma época do ano que não deixa ninguém indiferente. Misturam-se sentimentos, alegria, tristeza, nostalgia, esperança, tal como se misturam os reagentes para uma reação química. O Natal é mágico! Mas o que seria o Natal sem a Química? Ainda mais, o que seria o Natal sem reações químicas? O que seria o Natal sem a combustão?

De acordo com a enciclopédia Britannica, a combustão é uma reação química entre substâncias, geralmente incluindo o oxigénio, e normalmente acompanhada pela geração de calor e luz sob a forma de chama. A velocidade a que os reagentes se combinam é elevada, em parte devido à natureza da própria reação química, e em parte porque é gerada mais energia do que aquela que pode escapar para o meio circundante, o que faz com que a temperatura dos reagentes aumente para acelerar ainda mais a reação.

A manifestação mais visível da energia gerada nas reações de combustão é o fogo. O fogo deflagra quando os reagentes, isto é, os materiais inflamáveis e o comburente, que habitualmente é o oxigénio do ar, são aquecidos até à sua temperatura de ignição. Aprender a fazer fogo, ou melhor, aprender a iniciar e controlar as reações de combustão, teve um papel determinante no desenvolvimento das civilizações e um papel essencial na celebração do Natal.

Utilizamos a combustão, nomeadamente da gasolina, do gasóleo e do querosene, nas nossas deslocações para o reencontro com os nossos entes queridos. As duas primeiras ainda são o combustível mais utilizado nos veículos familiares, e o último é o combustível dos aviões que utilizamos quando as distâncias que nos separam são maiores. Quando nos reunimos, começam os rituais: acender a lareira, pôr a mesa, fazer o jantar, todas essas tradições que povoam a nossa memória e nos acompanham nestes dias. Tiramos partido da combustão da biomassa, em particular do tronco de Natal, para o aconchego junto de familiares e amigos à volta da lareira. Utilizamos a

combustão do gás para acender o fogão e preparar as iguarias tradicionais. Os tipos de gás utilizados mais habitualmente para uso doméstico são o gás liquefeito de petróleo (GLP) e o gás natural (GN). O gás liquefeito de petróleo é basicamente uma mistura de butano e propano, que pode ser obtido a partir do refinamento do petróleo ou obtido a partir das reservas de gás natural. O gás propano é mais pesado do que o ar, com uma densidade de vapor de 1,5. A sua temperatura de ignição é semelhante à do gás natural, entre 493 e 604 °C. O gás natural é, maioritariamente, metano, com uma pequena percentagem de nitrogénio, etano, propano, butano e outros gases em quantidade vestigial. O gás natural é mais leve do que o ar. A sua densidade é de 0,59 a 0,72. A sua temperatura de ignição é de 482 a 632 °C. O poder calorífico do gás liquefeito de petróleo é aproximadamente 28% maior do que o do gás natural. Isto significa que é possível obter mais energia a partir de uma menor quantidade de matéria-prima. A combustão da parafina permite-nos decorar as nossas casas e a nossa mesa de Natal com os mais variados tipos de velas.

Em suma, a combustão é uma reação química através da qual é produzido fogo, se liberta energia na forma de luz e calor que iluminam e aquecem a nossa vida, e nos oferece o Natal tal como o conhecemos.

## Saiba mais em:

Britannica, [britannica.com/science/combustion](https://www.britannica.com/science/combustion) (acedido em 24/11/2024).

Biomass combustion, [iebioenergyreview.org/biomass-combustion](https://iebioenergyreview.org/biomass-combustion) (acedido em 24/11/2024).

Cooking fuels, [philackland.com/wp-content/uploads/2012/03/05-cooking-fuels.pdf](https://philackland.com/wp-content/uploads/2012/03/05-cooking-fuels.pdf) (acedido em 24/11/2024).

Paulo Ribeiro Claro, "A química das coisas", Editora Universidade de Aveiro, Aveiro, 2013. A química das coisas em Apple Books. [aquimicadascoisas.org/?episodio=a-quimica-do-fogo](https://aquimicadascoisas.org/?episodio=a-quimica-do-fogo) (acedido em 24/11/2024).

>

**Marta Piñeiro**

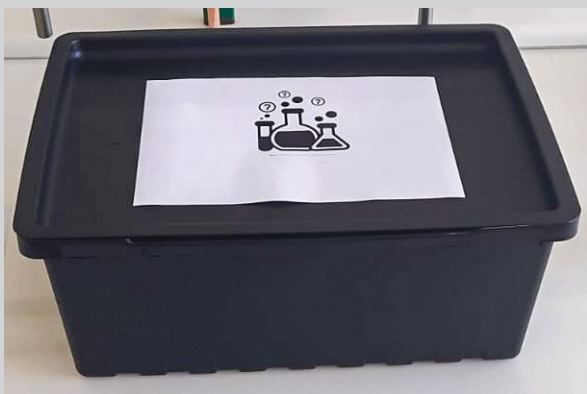
[mpineiro@qui.uc.pt](mailto:mpineiro@qui.uc.pt)

# O Desafio dos Materiais

>  
Marta C. Corvo

## Introdução

A atividade proposta nesta edição foi testada em diversos *workshops* com alunos e professores e consiste num jogo – O Desafio dos Materiais. Uma vez que houve vários pedidos para tornar o seu conteúdo público, aqui fica! Neste jogo pretende-se dar resposta a um conjunto de desafios utilizando somente o conteúdo de uma caixa que é fornecida. Os desafios ilustram diversas propriedades dos materiais no estado sólido, líquido e gasoso, bem como de reações químicas. A intenção será utilizar o espírito científico neste processo, não esquecendo que a experiência será um passo imprescindível. Neste jogo formam-se grupos de 2 a 3 pessoas. Cada grupo tem acesso a uma caixa, na qual existe o material a seguir mencionado, que deverá ser replicado tantas vezes quantos os grupos em jogo.



## Material

- **Tina (30 x 50 cm) com água**
- **Caixa para conter todo o material para cada grupo**
- **Material genérico:**
  - Folhas de papel absorvente
  - Água destilada
  - Tesoura
  - Lápis e folhas de papel para rascunho
- **3 sacos com ziplock**
- **Saco 1:**
  - 3 frascos com tampa de 50 mL
  - Açúcar
  - Hidrogenocarbonato de sódio
  - Amido de milho
- Frasco de 100 mL com vinagre
- 2 frascos contagotas de cerca de 10–15 mL
- 12 copos descartáveis de 30 mL
- Espátula descartável
- Pipeta descartável.
- **Saco 2**
  - Palhinha
  - 2 copos descartáveis de 30 mL
- **Saco 3**
  - Garrafa de água de plástico de 330 mL vazia
  - Rolha
  - Balão
  - 2 elásticos

# 1.

### Procedimento

Colocar o material genérico dentro da caixa.

# 2.

Identificar cada saco (**1, 2, 3**) e introduzir o material respeitante em cada um.

# 3.

No saco 1 encher e identificar os recipientes dos líquidos – **Vinagre, Tintura de Iodo** (diluída) e **Indicador de couve roxa**. Os recipientes dos sólidos – açúcar, hidrogenocarbonato de sódio e amido de milho – deverão ser cheios e rotulados respetivamente com **A, B e C**.

**4.** Aconselha-se um monitor por cada 1 a 2 grupos.

**5.** Em cada grupo, o monitor verifica a observação das regras, controla os tempos de início e execução de cada desafio, bem como dos questionários relativos a cada desafio. O monitor controla a pontuação do(s) grupos a seu cargo.

**6.** No início do jogo, o material encontra-se todo dentro da caixa. Os jogadores podem retirar o material genérico no início, e os sacos de cada desafio no seu tempo respetivo.



### Instruções para os Jogadores

Neste jogo pretende dar-se resposta a um conjunto de desafios utilizando **somente** o conteúdo de uma caixa que é fornecida. O objetivo da atividade é responder aos desafios propostos, utilizando para isso o material fornecido. O material genérico pode ser retirado do interior da caixa no início. Cada grupo deverá ter um monitor. Antes de passar à resolução prática do desafio aconselha-se estabelecer um plano de ação. O jogo demora em média 1:30-2:00 h.

### Regras do Jogo

1. Cada desafio tem um tempo limitado que será controlado pelos monitores de cada grupo:

Desafio 1 - 10 minutos

Desafio 2 - 10 minutos

Desafio 3 - 30 minutos

2. Cada desafio tem uma pontuação:

Desafio 1 - 15 pontos

Desafio 2 - 15 pontos

Desafio 3 - 25 pontos

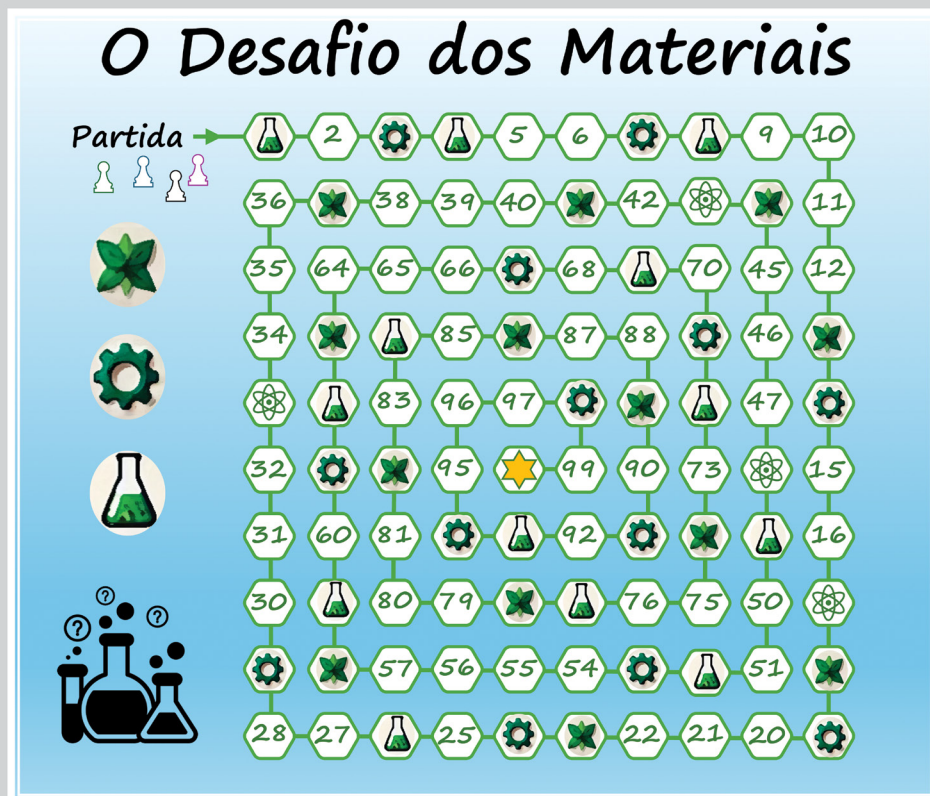
3. Cada desafio será resolvido utilizando o material fornecido para aquele desafio e, se necessário, o material fornecido para os desafios anteriores. NÃO pode ser utilizado o material fornecido para os desafios seguintes.

4. Cada desafio dispõe de três pistas. Estas pistas estão com os monitores. Cada pista solicitada retira cinco pontos à pontuação final.

5. O primeiro grupo a terminar cada desafio ganha um *Joker*. Cada *Joker* vale cinco pontos ou podem ser trocados por pistas.

6. A seguir a cada desafio, existe um questionário para responder em 5 minutos. O questionário deve ser respondido e entregue ao monitor de cada grupo após a sua conclusão. Cada questionário vale 10 pontos.

## O Jogo



### Desafios

#### **Desafio 1 - Descobrir as Substâncias Desconhecidas - 15 Pontos**

O senhor Bonifácio foi à mercearia do bairro comprar ingredientes para a neta fazer um bolo para seu aniversário. A lista continha várias substâncias: hidrogenocarbonato de sódio, amido e açúcar. Quando chegou a casa reparou que não tinha rotulado os frascos. **SEM PROVAR, ajude o senhor Bonifácio e identifique as substâncias A, B e C.**

#### **Desafio 2 - Aquecimento Global - 15 Pontos**

Todos os anos a dona Maria passa os verões na sua casa à beira-mar. Este ano, assim que chegou, reparou que as hortênsias cultivadas à entrada da casa estavam cor-de-rosa e não azuis, como quando as havia plantado. Desesperadamente, ligou para um engenheiro agrônomo, a perguntar se podia ser efeito de algum veneno. No entanto, dada a localização da casa de férias da dona Maria, o engenheiro acalmou-a dizendo que não havia nada a temer.

**Formule uma teoria, coloque hipóteses, planeie uma experiência e apresente provas sobre o que pode ter acontecido às flores.**

#### **Desafio 3 - O Poder da Química - 25 Pontos**

Dois irmãos, Leandro e Leonardo, foram pescar em lados opostos de uma lagoa. Após algumas horas sem pescar nada, o Leonardo resolveu voltar para casa. Contudo, apercebeu-se que era o Leandro

que tinha as chaves de casa. Contornando a lagoa, do local onde estava até ao irmão, o Leonardo iria demorar 2 h. Então, pediu ao irmão que criasse um veículo capaz de transportar a chave até ao outro lado.

**Sabendo que os veículos são movidos por reações químicas, apresente uma solução para o problema em questão. Assim como um veículo tradicional, o protótipo aqui construído, deverá mover-se somente quando lhe for dado o comando, apenas após o tempo fornecido para a sua resolução. O teste ocorrerá na tina com água.**

Neste desafio será pontuado: velocidade do veículo; trajeto percorrido, e por último, a criatividade e elegância do protótipo.

### Explicação

No Desafio 1, os jogadores deverão testar os sólidos brancos com os líquidos fornecidos. Usando os copos de 30 mL, podem testar-se os três sólidos adicionando pequenas quantidades de água, vinagre, Tintura de lodo e o Indicador de couve roxa. Nestes testes pode utilizar-se um racional semelhante ao referido em [1]. No Desafio 2 associamos o evento ao aquecimento global, como tal o CO<sub>2</sub> na atmosfera, e as chuvas ácidas resultantes deverão ter responsabilidade no assunto. A hipótese de trabalho deverá contemplar esta possibilidade. Para executar uma experiência que o comprove, os jogadores devem provar que o CO<sub>2</sub> tem a capacidade de acidificar a água. Utilizando dois copos com água e indicador de couve roxa, mantendo um como controlo, irão soprar com o auxílio da palhinha no outro copo, ao fim de algum tempo, este mudará de cor. O efeito nas flores deverá ocorrer através de um mecanismo semelhante. O racional será semelhante ao referido em [2]. No Desafio 3, os jogadores deverão utilizar como propulsão o CO<sub>2</sub> em forma de gás, que se liberta quando juntamos o hidrogenocarbonato de sódio ao vinagre. Para tal, devem

colocá-los dentro da garrafa de modo que fiquem separados e só se juntem quando o teste do protótipo tiver início, utilizando por exemplo, os balões fornecidos. O protótipo deve flutuar e mover-se na direção pretendida. Para tal, a libertação de CO<sub>2</sub> deverá ser direcionada com o auxílio da palhinha por exemplo.



### Material Suplementar

Tabuleiro de jogo, exemplos de pistas e questionários disponíveis como material suplementar em [spq.pt/files/files/BSPQ/N175-artigo\\_EMN175.pdf](http://spq.pt/files/files/BSPQ/N175-artigo_EMN175.pdf).

### Bibliografia

- [1] M. C. Corvo, *Química* **2011**, 122, 69–72. DOI: 10.52590/M3.P652.A30001672.  
 [2] M. C. Corvo, *Química* **2019**, 152, 79–81. DOI: 10.52590/M3.P687.A30002188.

>

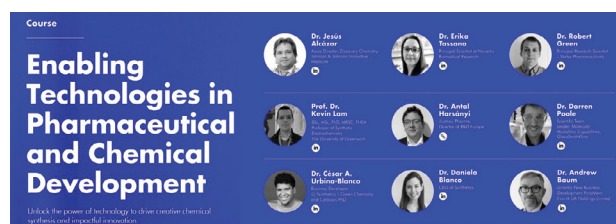
#### Marta C. Corvo

*Faculdade de Ciências e Tecnologia,  
 Universidade Nova de Lisboa.  
 i3N|CENIMAT.*

Marta Corvo é investigadora no i3N|CENIMAT, Dep. Ciência dos Materiais da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa, dedicada à ressonância magnética nuclear. Além da divulgação de ciência, interessa-se pelo desenvolvimento de novos materiais para captura de CO<sub>2</sub>, armazenamento de energia e preservação de obras de arte.  
[marta.corvo@fct.unl.pt](mailto:marta.corvo@fct.unl.pt)  
[ORCID.org/0000-0003-0890-6133](https://orcid.org/0000-0003-0890-6133)

## Enabling Technologies in Pharmaceutical and Chemical Development

A Escola de Executivos da NOVA FCT, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa, em parceria com a Universidade de Greenwich, apresenta a 2.ª Edição do Curso *Enabling Technologies in Pharmaceutical and Chemical Development*, um programa inovador e internacional que irá decorrer de 14 a 17 de abril de 2025, nas instalações da NOVA FCT. Este curso pioneiro visa promover a transferência de conhecimento entre academia e indústria através da apresentação de tecnologias de ponta para o desenvolvimento químico e farmacêutico. Pretende-se contribuir para o fortalecimento de novas técnicas laboratoriais, estimular a criatividade em síntese orgânica e promover práticas mais sustentáveis na indústria e na academia. O curso está alinhado com os objetivos da Unidade de Investigação em Química Verde (LAQV), existente na NOVA FCT. O programa oferece uma visão abrangente e prática sobre tecnologias emergentes, como química de fluxo, eletroquímica



(com módulo prático), fotocatalise, biocatalise, *machine learning*, inteligência artificial e tecnologia de membranas. Para além destes tópicos, serão também abordados temas como a síntese química “high-throughput”, o desenvolvimento químico, e a larga escala nas indústrias química e farmacêutica, preparando profissionais para se destacarem no setor químico e farmacêutico. As aulas, combinando teoria e prática, serão conduzidas por especialistas internacionais da indústria e academia, tais como o Dr. Jesús Alcázar (Johnson & Johnson), a Dr.ª Erika Tassano (Novartis), o Dr. Darren Poole (GlaxoSmithKline), o Dr. Robert Green (Vertex) e o Prof. Kevin Lam (*University of Greenwich*), entre outros. Inscreva-se.

Mais informações disponíveis em: [execed.fct.unl.pt/en/skills\\_building\\_prog/enabling-technologies-in-pharmaceutical-and-chemical-development](https://execed.fct.unl.pt/en/skills_building_prog/enabling-technologies-in-pharmaceutical-and-chemical-development)

## 22<sup>nd</sup> International Conference on Carbon Dioxide Utilization (ICCDU 2025)



O ICCDU 2025 irá ser organizado pela primeira vez em Lisboa, e decorrerá de 23 a 27 de junho de 2025. A 22.ª edição do ICCDU será organizada conjuntamente pelo IST-Universidade de Lisboa e pela *NOVA School of Science and Technology*, em parceria com a Sociedade Portuguesa de Química. Sob o tema “CO<sub>2</sub> para uma Economia Circular”, o ICCDU 2025 seguirá o sucesso

das edições anteriores da série ICCDU, fornecendo uma plataforma vital para a troca de conhecimentos, abordagens inovadoras e impulsionando soluções pioneiras e tecnologias sustentáveis para acelerar em direção a uma economia circular de carbono mais eficaz.

Mais informações disponíveis em: [iccd2025.events.chemistry.pt](https://iccd2025.events.chemistry.pt)

## 27<sup>th</sup> International Conference on Chemical Thermodynamics (ICCT2025)

A ICCT2025, que decorrerá no Porto, Portugal, entre 20 e 24 de julho de 2025, constitui uma oportunidade única para os investigadores de todo o mundo especializados em Termodinâmica Química apresentarem a sua investigação e trocarem experiências valiosas. Ao reunir cientistas académicos de diversas regiões do mundo, esta conferência visa proporcionar um fórum para discutir uma vasta gama de tópicos relacionados



e as suas propriedades e aplicações. O objetivo global é promover debates e colaborações científicas numa atmosfera socialmente dinâmica e intelectualmente estimulante que inspirará novas aplicações no domínio do desenvolvimento sustentável.

Mais informações disponíveis em: [icct2025.events.chemistry.pt](http://icct2025.events.chemistry.pt)

## 21<sup>st</sup> European Symposium on Fluorine Chemistry

O 21<sup>st</sup> European Symposium on Fluorine Chemistry realizar-se-á em Lisboa, Portugal, entre 3 e 9 de agosto de 2025, tendo como anfitriã a Universidade NOVA de Lisboa em parceria com a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). O ESFC Lisboa reunirá um grande número de investigadores internacionais da academia, institutos de investigação e indústria. O programa científico oferece fóruns que cobrem uma vasta gama de química aplicada e fundamental do flúor. Oferecerá conhecimentos de química física e teórica e dos domínios das tecnologias envolvendo o flúor, processos sustentáveis, biomedicina e ciência dos materiais, entre outros.



Mais informações disponíveis em: [21-esfc-lisbon.events.chemistry.pt](http://21-esfc-lisbon.events.chemistry.pt)

## International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2025)

A 6.<sup>a</sup> edição do *International Symposium on Synthesis and Catalysis* (ISySyCat2025), terá lugar na Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra, na cidade de Coimbra, entre 2 e 5 de setembro de 2025. A conferência centrar-se-á em tópicos-chave da síntese e catálise contemporânea de materiais orgânicos, organometálicos, polímeros e materiais, que são rele-



vantes tanto para os químicos académicos como para os industriais. De um modo geral, o ISySyCat centra-se fortemente na síntese química com catálise associada a várias tecnologias facilitadoras, como os métodos de fluxo contínuo, a catálise fotorredox e a eletrossíntese.

Mais informações disponíveis em: [isysycat2025.events.chemistry.pt](http://isysycat2025.events.chemistry.pt)



# Agenda

(por razões alheias ao *Química*, alguns dos eventos poderão sofrer ajustes de calendarização)

## > fevereiro de 2025

06 - 07 de fevereiro de 2025, Camberra, Austrália  
Supramol25  
raci.org.au/events

11 de fevereiro de 2025, *online*  
IUPAC Global Women's Breakfast (#GWB2025)  
iupac.org/gwb

18 - 19 de fevereiro de 2025, Jerusalém, Israel  
88<sup>th</sup> Annual Meeting of the  
Israel Chemical Society (ICS)  
chemistry.org.il/conference

27 de fevereiro - 02 de março de  
2025, Seul, Coreia do Sul  
13<sup>th</sup> International Conference on Bioinformatics and  
Computational Biology (ICBCB 2025)  
icbc.org/index.html

## março de 2025

01 - 05 de março de 2025, Boston, EUA  
Pittcon 2025  
pittcon.org

09 - 14 de março de 2025, Aveiro, Portugal  
SupraLife Third School "Supramolecular  
Multifunctional Biomaterials"  
supralife.eu/thirdschool

10 - 13 de março de 2025, Hannover, Alemanha  
33<sup>rd</sup> Annual Meeting of the German  
Crystallographic Society  
dgg-conference.de

23 - 27 de março de 2025, San Diego, EUA  
ACS Spring 2025 National Meeting & Exposition  
acs.org/meetings/acs-  
meetings/future-meetings.html

24 - 26 de março de 2025, *online*  
X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS/ESCA) and  
Data Processing Short Course  
surfaceanalysis.org/Online\_Short\_Courses.html

26 - 29 de março de 2025, Osaka, Japão  
105<sup>th</sup> CSJ Annual Meeting 2025  
pub.conf.it.atlas.jp/en/event/csj105th

## abril de 2025

13 - 16 de abril de 2025, Darwin, Austrália  
Medicinal Chemistry & Chemical  
Biology Conference (MCCB 2025)  
mccb2025.com.au

14 - 17 de abril de 2025, Costa da Caparica, Portugal  
Enabling Technologies in Pharmaceutical  
and Chemical Development  
execed.fct.unl.pt/en/skills\_building\_prog/  
enabling-technologies-in-pharmaceutical-and-chemical-development

28 - 30 de abril de 2025, Faro, Portugal  
9<sup>th</sup> Portuguese Young Chemists Meeting (9 PYChem)  
9pychem.events.chemistry.pt

## maio de 2025

04 - 08 de maio de 2025, Brunner, Suíça  
SCS Conference on Stereochemistry 2025  
(Bürgenstock Conference)  
scg.ch/component/eventbooking/bc25

05 - 07 de maio de 2025,  
Mülheim an der Ruhr, Alemanha  
100 Years Fischer-Tropsch Process  
dechema.de/en/Fischer\_  
Tropsch\_Process\_2025.html

13 - 15 de maio de 2025, Barcelona, Espanha  
12<sup>th</sup> International Chlor-Alkali Technology  
Conference and Exhibition  
eurochlor2025.org

13 - 15 de maio de 2025, Rüdeshheim, Alemanha  
Beilstein Nanotechnology Symposium 2025  
beilstein-institut.de/en/symposia/defect-  
mediated-engineering-of-nanomaterials

18 - 22 de maio de 2025, Montreal, Canadá  
247<sup>th</sup> ECS Meeting  
electrochem.org/247

18 - 23 de maio de 2025, Porto, Portugal  
15<sup>th</sup> Fundamentals of Adsorption (FOA15)  
foa15.events.chemistry.pt

19 - 21 de maio de 2025, *vários locais pelo mundo*  
Pint of Science 2025  
pintofscience.com

20 de maio de 2025, *vários locais pelo mundo*  
World Metrology Day  
worldmetrologyday.org

### junho de 2025

10 - 13 de junho de 2025, St. Andrews, Escócia  
International Conference on Sustainable  
Chemistry for Net Zero (ICSC-NZ)  
icsc-nz.com

12 - 13 de junho de 2025, Chicago, EUA  
EWOC 2025 (Empowering  
Women in Organic Chemistry)  
ewochem.org

16 - 18 de junho de 2025, Estocolmo, Suécia  
3<sup>rd</sup> National Meeting of the Swedish  
Chemical Society (SCS2025)  
scs2025.se

22 - 27 de junho de 2025, Groningen, Países Baixos  
European Polymer Congress 2025 (EPF 2025)  
epf2025.org

23 - 27 de junho de 2023, Lisboa, Portugal  
22<sup>nd</sup> International Conference on  
Carbon Dioxide Utilization  
iccd2025.events.chemistry.pt

### julho de 2025

14 - 16 de julho de 2025, Kuala Lumpur, Malásia  
9<sup>th</sup> Edition of Malaysia International Scientific  
Instruments and Laboratory Equipment Exhibition  
and Conference (LabAsia2025)  
lab-asia.com

14 - 19 de julho de 2025, Kuala Lumpur, Malásia  
50<sup>th</sup> World Chemistry Congress & 53<sup>rd</sup>  
General Assembly (IUPAC 2025)  
iupac2025.org

20 - 24 de julho de 2025, Porto, Portugal  
27<sup>th</sup> International Conference on Chemical  
Thermodynamics (ICCT2025)  
icct2025.events.chemistry.pt

### agosto de 2025

03 - 09 de agosto de 2025, Lisboa, Portugal  
21<sup>st</sup> European Symposium on  
Fluorine Chemistry (ESFC-Lisbon)  
21-esfc-lisbon.events.chemistry.pt

17 - 21 de agosto de 2025, Washington, EUA  
ACS Fall 2025 National Meeting & Exposition  
acs.org/meetings/acs-  
meetings/future-meetings.html

24 - 28 de Agosto de 2025, Sydney, Austrália  
32<sup>nd</sup> International Symposium on the Chemistry of  
Natural Products & 12<sup>th</sup> International Congress on  
Biodiversity (ISCNP-32/ICOB-12)  
iscnp32-icob12.org

31 de Agosto - 04 de setembro de  
2025, Barcelona, Espanha  
Euroanalysis 2025  
euroanalysis2025.com/index.php

31 de agosto - 05 de setembro de  
2025, Trondheim, Noruega  
16<sup>th</sup> European Congress on  
Catalysis (EuropaCat 2025)  
ntnu.edu/web/europacat2025/europacat2025

### setembro de 2025

02 - 05 de setembro de 2025, Coimbra, Portugal  
International Symposium on Synthesis and  
Catalysis (ISySyCat2025)  
isysycat2025.events.chemistry.pt

05 - 06 de setembro de 2025, Nova Deli, Índia  
Asian Chemicals Forum (ACF 2025)  
asianchemicalsforum.com

07 - 12 de setembro de 2025, Mainz, Alemanha  
76<sup>th</sup> Annual Meeting of the International  
Society of Electrochemistry  
annual76.ise-online.org

08 - 10 de setembro de 2025, Lisboa, Portugal  
15<sup>th</sup> European Congress of Chemical Engineering  
(ECCE) & 8<sup>th</sup> European Congress of Applied  
Biotechnology (ECAB) & 3<sup>rd</sup> Iberoamerican Congress  
on Chemical Engineering (CIBIQ)  
ecce-ecab2025.eu

14 - 17 de setembro de 2025, Monastir, Tunísia  
39<sup>th</sup> International Conference on Solution Chemistry  
sctunisie.org/icsc2025

23 - 25 de setembro de  
2025, Nuremberga, Alemanha  
POWTECH 2025 & PARTEC 2025  
powtech-technopharm.com/en

29 de setembro - 01 de outubro de  
2025, Karlsruhe, Alemanha  
Science Forum Chemistry 2025  
gdch.science



9898

Boletim da Sociedade  
Portuguesa de Química

# Química

[www.spq.pt](http://www.spq.pt)

outubro-dezembro  
Vol. 48 | N.º 175 | 2024

2359

2359



SOCIEDADE  
PORTUGUESA  
DE QUÍMICA

9898