

Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

5,00 € - Distribuição
gratuita aos sócios da SPQ

abril - junho
Vol. 47 | N.º 169 | 2023
Publicação Trimestral

Química





Editorial | 62

Direção | 63

In Memoriam | 64

Notícias

67

Livros | 79

Interação Química

83

Galopim de Carvalho - Uma Joia Portuguesa
| 83

Atualidades Científicas | 93

Ongoing

96

MIP2Sensors: Uma Ferramenta “Light-up”
para a Análise de Pesticidas em Azeite | 96

Artigos

97

As Cientistas na Linha da Frente – Igualdade
de Género | 97

Catálise de Mn para a Formação Sustentável
e Eficiente de Iminas: um Passo Rumo a
uma Via Bimetálica *One-pot* para a Síntese
de *N*-Heterociclos | 105

Da Somatostatina à Sandostatina® | 111

ULYSSES: Química Semi-Empírica para
Macrossistemas | 116

Nas Redes | 121

Química Entre Nós | 122

Espaço dos Mais Novos | 123

Destques | 125

Agenda | 127



O Dia Internacional da Mulher de 2023, assinalado no passado dia 08 de março, salientou a importância da diminuição das diferenças de género na ciência, na tecnologia e na inovação. Num artigo no Jornal Público desse dia, com o título “Um apelo urgente à ação no Dia Internacional das Mulheres”, o Secretário-Geral da ONU, António Guterres, destacou a necessidade de serem tomadas medidas em várias frentes para garantir que as mulheres possam contribuir para “o acervo mundial do conhecimento através da ciência e das tecnologias”.

Ao longo da história persistiram preconceitos e foram criados estereótipos que dificultaram a afirmação do papel da mulher na ciência. Como

refere Raquel Gonçalves-Maia no artigo deste número do QUÍMICA, “o estudo das ciências, salvo raríssimas exceções, esteve interdito às mulheres, uma vez que se considerava que elas eram desprovidas do equipamento intelectual apropriado, eram frágeis, delicadas e pouco ou nada originais”. No entanto, as mulheres têm sido figuras notáveis na história da ciência. Por exemplo, e tendo como inspiração o subtítulo do livro publicado recentemente por João Paulo André, *a Química no Feminino* deu-nos a conhecer *Perfumistas e hermetistas, Monjas e alquimistas, Castas e guardadoras de segredos, Atomistas e “femmes savantes”, Iluminadas e revolucionárias, Autoras e leitoras, Mestres e aprendizes, Domésticas e cientistas, Pioneiras e inspiradoras, Colegas e assistentes, Esposas e parceiras, Nobelizadas e nobelizáveis*. As suas histórias, inspiradoras, revelam as barreiras que tiveram de enfrentar para que se pudessem também dedicar à causa da ciência, a que acresce o facto de, pela natureza humana, a maternidade ter-lhes sido atribuída. Com a evolução da sociedade, assistiu-se a uma mudança progressiva de mentalidades e tornou-se claro que o acesso equitativo e a participação ativa das mulheres são fundamentais para promover a inovação e o avanço científico. O reconhecimento conquistado foi adquirido pelo mérito e o mérito não tem género.

Em Portugal, a Ciência Viva homenageia mulheres cientistas portuguesas com a edição do livro “Mulheres na Ciência”. Nas quatro edições já publicadas, a última das quais em 2023, presta-se um tributo a mulheres que têm contribuído para o desenvolvimento da ciência em Portugal e além-fronteiras, inspirando jovens (mulheres e homens) a seguir as suas pisadas.

Neste número do QUÍMICA, a igualdade de género está patente nos artigos publicados. Na química no feminino, para além do artigo de Raquel Gonçalves-Maia, “As Cientistas na Linha da Frente - Igualdade de Género”, Bruna F. L. Guerreiro e Mariana N. José abordam o tema da acromegalia e do fármaco usado no tratamento desta doença. Na química no masculino, Nuno Viduedo apresenta uma via bimetalica *one-pot* para a síntese sustentável de indoles e azaindoles, e Filipe Menezes e Grzegorz M. Popowicz apresentam ULYSSES, uma biblioteca de métodos semi-empíricos de química quântica, que permite descrições mais realistas de sistemas moleculares. Um destaque particular para a Interação Química com Galopim de Carvalho, uma *Joia Portuguesa*, e para a homenagem a Hugh Douglas Burrows, “um ser humano de excelência e um académico de referência que marcou o ensino e a investigação em Química na Universidade de Coimbra, a nível nacional e internacional”. Uma palavra final para o texto do Secretário-Geral da SPQ sobre o ChatGPT, uma entidade (aparentemente) sem género, e a sua entrada no domínio da Química.

As mulheres voam / como os anjos: / Com as suas asas feitas / de cristal de rocha da memória / Disponíveis / para voar / soltas... (excerto de Anjos mulheres - VI, de Maria Teresa Horta).

>

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 169, abril - junho 2023

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.comrodrigo.pnina@gmail.com

Tel.: 964 819 822

IMPRESSÃO E ACABAMENTO

Sersilto, Empresa Gráfica, Lda.

Travessa Sá e Melo, 209, Apartado 1208

4470-116 Gueifães, Maia

+351 229 436 920

administracao@sersilto.pt

Tiragem: 1.250 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

O ChatGPT a Chegar à Química

“A Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) é uma associação científica sem fins lucrativos que tem como objetivo promover o desenvolvimento da química em Portugal. Foi fundada em 1911 e é reconhecida como uma das principais organizações representativas dos profissionais e investigadores na área da química em Portugal. A SPQ tem como missão fomentar a investigação científica em química, promover a formação e educação nessa área, bem como facilitar a colaboração entre os investigadores, professores, estudantes e profissionais de química em Portugal.”

O parágrafo anterior foi escrito pelo ChatGPT em resposta à questão “O que é a Sociedade Portuguesa de Química?” O ChatGPT pode responder a quase tudo (por vezes diz, educadamente, que não sabe!), entrando assim no campo do ensino e aprendizagem, também na Química.

Desde finais de 2022, quando o ChatGPT foi introduzido pela OpenAI, que se tem vindo a discutir a influência que poderão ter estas ferramentas de Inteligência Artificial (IA) nos processos habituais de transmissão/aquisição de conhecimento. A preocupação mais evidente surge na parte da avaliação de conhecimentos, pois estas ferramentas, em resposta a uma pergunta direta, podem produzir texto de um modo imediato, com impacto previsível, por exemplo, na elaboração de relatórios de trabalhos laboratoriais. Sendo a Química uma ciência experimental, o tratamento e a discussão de dados não sofrerão muito impacto, mas as introduções dos relatórios, sim. Isto sugere maior atenção à avaliação oral, por via da discussão dos relatórios apresentados.

Mais importante que o impacto que as ferramentas de IA poderão ter na avaliação de conhecimentos (já começam a existir programas que detetam textos produzidos por IA, por exemplo, *AI Content Detector - Detect ChatGPT Plagiarism*), será identificar as vantagens e os perigos destas ferramentas junto dos alunos. Isto implicará um investimento por parte dos professores na exploração deste tipo de programas, de modo a poderem aperceber-se das suas potencialidades e limitações, e ponderarem o seu uso na transmissão, aquisição e avaliação de

conhecimentos [1]. Por exemplo, muitos alunos (e professores) têm o “medo da página em branco”, aquele tempo de inspiração que tarda a surgir ao iniciar um texto. O ChatGPT pode contribuir para desbloquear esse impasse, sugerindo alguma frase inicial em resposta a um pedido simples, abrindo com isso a porta a partir do qual se elabora o texto. Muito há a descobrir no uso construtivo destes programas, sendo a produção de texto um dos exemplos.

Será sempre importante enquadrar devidamente o uso destes programas, assim como transmitir algumas indicações fundamentais. Em termos de enquadramento, há que definir em que situações se espera poder tirar proveito do uso de programas de IA, de modo a usá-los não apenas para produzir conteúdo, mas explorá-los como possível ferramenta de aprendizagem. Durante o seu uso, há que dar atenção a diversos aspetos: i) quanto mais dados se fornecerem ao programa, mais completas serão as respostas; ii) não confiar nas respostas, antes confirmá-las junto de outras fontes (começar por usar em áreas que se conhecem bem para poder aferir a qualidade das respostas, e assim ir ganhando conhecimento da capacidade do programa); iii) a IA é um programa de *software* e, quando usado, deve ser referido (em que parte do trabalho foi usado, e para que fim).

Algumas sociedades científicas de química começam a abordar a questão do uso de programas de IA no ensino da Química [1] e estes programas já influenciam aparentemente alguns modos de funcionamento das instituições de ensino [2].

[1] M. E. Emenike, B. U. Emenike, *J. Chem. Educ.* **2023**, *100*, 1413-1418. DOI: 10.1021/acs.jchemed.3c00063.

[2] T. Williams, J. Grove, *Five ways AI has already changed higher education*, *Times Higher Education*, **2023**, 15 de maio (acedido em 18/05/2023).

>

A. Jorge Parola

Secretário-Geral da SPQ
ajp@fct.unl.pt

Hugh Douglas Burrows

(n. 30 de março de 1945 f. 12 de março de 2023)

O Professor Hugh Douglas Burrows, Professor Burrows, Doutor Burrows, ou simplesmente Hugh, foi um ser humano de excelência e um académico de referência que marcou o ensino e a investigação em Química na Universidade de Coimbra, a nível nacional e internacional. O seu carácter afável, a sua constante disponibilidade para discutir ciência, a sua capacidade única de transmitir conhecimento, própria de um verdadeiro Mestre, e o indiscutível sentido de dever público, permitiu-lhe granjear o respeito dos muitos que com ele conviveram ao longo de várias décadas.

Hugh Burrows nasceu a 30 de março de 1945 em Worthing, Inglaterra. Casado com Jean Burrows, as suas duas filhas, Alison e Vivian, nasceram em Inglaterra e na Nigéria, respetivamente, e o seu filho mais novo, Christopher, já em Portugal.

A sua carreira académica iniciou-se com a licenciatura em Química (1966), pela Universidade de Londres. Mudou-se seguidamente para a Universidade de Sussex onde obteve, em 1969, o doutoramento em Química-Física Orgânica com a tese "*The Nucleophilic Character of the Carbonyl Group*", sob supervisão de R. M. Topping. Concluída esta etapa foi, entre 1969 e 1972, *Research Fellow* e *Lecturer* em Química-Física na Universidade de Warwick e, entre 1972 e 1973, *Research Associate* na Universidade de Tel-Aviv, Israel.

Na Universidade de Londres, conheceu o Professor Sebastião Formosinho, na altura a efetuar o doutoramento no *Imperial College*, e desse conhecimento, e da afinidade científica que se gerou, resultou, em 1972, o convite para integrar o Departamento de Química da Universidade de Coimbra como professor e investigador. Aí iniciou o desenvolvimento dos estudos sobre o ião uranilo, tema que foi, durante mais de uma década, certamente uma das forças motrizes do grupo de fotoquímica de Coimbra. Em 1976 mudou-se para a Nigéria onde, na Universidade de Ife, foi Professor de Química até 1983, regressando nesse ano à Universidade de Coimbra, onde obteve o grau de agregado em 2001 e onde foi presidente do Conselho Científico do Departamento de Química e do Centro de Química, tendo-se jubilado em 2016. Mesmo após a sua jubilação, manteve-se cientificamente ativo, como membro do Centro de Química de Coimbra e como Editor Científico da revista *Pure and Applied Chemistry*.

O Doutor Burrows cultivou uma grande variedade de áreas do saber na Química. De entre elas, como ele próprio ressaltou, como de maior impacto, po-



límeros, incluindo polímeros orgânicos conjugados, surfactantes, remediação ambiental, luminescência e, de uma forma mais geral, a fotoquímica. O Professor Burrows era impulsionador e catalisador de encontros, de que foram exemplo os *Workshop on Luminescent Conjugated Polymers* que se realizavam, anualmente, em diferentes cidades de Portugal e, que de forma muito informal, juntavam, durante um dia, saberes de diferentes áreas, para além da química, na discussão dos polímeros orgânicos conjugados.

Esta pluridisciplinaridade da ciência que o Dr. Burrows cultivava encontra-se espelhada nas suas mais de 400 publicações e mais de 13000 citações recebidas. Ressalve-se ainda a sua contribuição no âmbito da educação em química e as múltiplas, e bem-sucedidas, orientações de alunos de licenciatura, mestrado e doutoramento que tanto impacto tiveram na academia e na indústria. Refira-se a enorme rede de colaborações científicas nacionais e internacionais, que se transformaram também, devido ao seu carácter, em amizades para a vida. A propósito desta rede, foi possível, no âmbito do oitavo encontro nacional de fotoquímica, celebrar os seus 60 anos, e aproveitando uma analogia descrita por ele próprio, mostrar que estas colaborações eram como que fazer uso de múltiplos



tiplos chapéus. O quadro que então lhe foi oferecido, em forma de caricatura, ilustra bem esta faceta que o próprio Dr. Burrows descreveu.

As contribuições de Hugh Burrows para a ciência foram também reconhecidas através de muitos prémios que recebeu. Foi eleito *Fellow* (Associado) do *Royal Institute of Chemistry* em 1970, membro associado correspondente da Classe de Ciências da Academia das Ciências de Lisboa, em 1987, *Fellow* da *Royal Society of Chemistry* em 1990, membro da Academia das Ciências de Nova Iorque em 1992 e, em 2004, foi galardoado com o Prémio “Estímulo à Excelência” da Fundação para a Ciência e a Tecnologia, FCT.

Seguindo o pensamento de Eduardo Lourenço, e como não existimos sem o outro, a morte do outro é também a nossa morte. Resta-nos o inestimável legado científico e, sobretudo, a memória.

> **Alberto Canelas Pais**
pais@qui.uc.pt

> **Artur J. M. Valente**
avalente@ci.uc.pt

> **Mariette Pereira**
mmpereira@qui.uc.pt

> **J. Sérgio Seixas de Melo**
sseixas@ci.uc.pt

DUAS EMPRESAS UM SERVIÇO



www.laborspirit.com



**Equipamentos de Laboratório
& Serviços**

www.qlabo.pt



A SPQ Celebra o IYBSSD 2022-2023

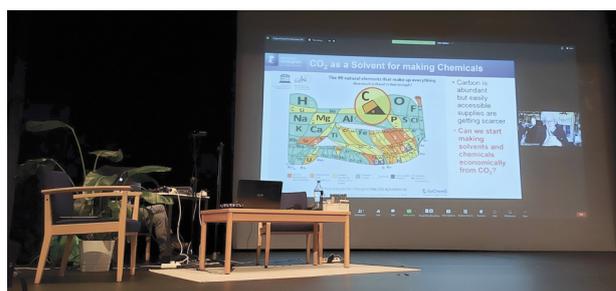
Integrada no Ano Internacional das Ciências Básicas para o Desenvolvimento Sustentável (IYBSSD), inaugurado pela UNESCO a 8 de julho de 2022, a primeira edição da *Ação Desafios Sociais e Sustentabilidade* ganhou forma no Encontro “SPQ Celebra IYBSSD 2022-2023”.

Os tópicos escolhidos para este evento focaram-se na Agenda 2030 das Nações Unidas e nos 17 Objetivos do Desenvolvimento Sustentável (ODS) nela contemplados, incitando à mudança decisiva para uma Humanidade mais justa, consciente e consequente.

Acreditando que a educação científica e a promoção das forças de caráter dos jovens para a sustentabilidade, a responsabilidade social e a responsabilidade ambiental são motores de esperança na concretização desses objetivos, procurou-se proporcionar aos participantes uma reflexão fundamentada, integradora de diversos saberes, acerca do contributo de cada um dos 8 mil milhões de nós para o estado do mundo e para a necessária adaptação e remediação do que urge e se impõe para o melhorar.

A diversidade de temas abordados nas dez palestras foi notável, quer pela pertinência atual e qualidade das apresentações, quer por proporcionar uma visão globalizante da articulação entre ciência e tecnologia, desenvolvimento social, consciência e ética do impacto ambiental da vida de cada indivíduo e da comunidade, essencial para o afamado, mas ainda negligenciado, desenvolvimento sustentável das civilizações contemporâneas. O apelo aos ODS foi transversal a todas as palestras, refletindo a convergência das preocupações de todos os formadores.

O auge do Encontro foi a palestra de Sir Martyn Poliakoff, de ascendência russa, mas amigo da Ucrânia. Desafiou-nos a refletir sobre o “Quanto esta atividade impacta outras atividades na sociedade”, tendo como pano de fundo a Tabela Periódica da Sustentabilidade, que reflete o suporte dos pilares Social, Ambiental e Económico na conquista dos 17 ODS. Questionou: “Poderemos desenvolver solventes químicos a partir do CO₂?”. Explicou a relevância da miscibilidade do Hidrogénio (Verde) em fluídos supercríticos, mas reconheceu que a compressibilidade do CO₂ requer tanta energia que é economicamente inviável (por enquanto...). Reforçou ainda a importância da valorização de resíduos, reutilizando-os numa economia circular. Terminou em esperança ao informar que, em cinco anos, alguns químicos (verdes) reduziram o consumo de substâncias químicas num fator de dois (massa de resíduos, incluindo solvente / massa de produtos valorizados). Partilhou com o jovem Artur, de 8 anos – seu regular seguidor pelo YouTube – que



Palestra de Sir Martyn Poliakoff.

o seu elemento favorito é o sódio, porque a sua mãe se chamava Ina e todos lhe chamavam Na.

O Prof. Adelino Galvão, para além de nos presentear com uma técnica criativa sobre a determinação da velocidade do som com a colaboração da orquestra do Conservatório de Sintra e do seu Saxofone, alertou-nos para o facto de os nossos *smartphones* serem “de sangue”, na medida em que o Tântalo (usado na indústria de condensadores e que permite que os telemóveis sejam finos) neles usados provoca conflitos regionais no Congo e no Ruanda. Também falou do Carbono, quase todo proveniente do norte de África, onde é extraído desumanamente. Salientou a necessidade de supercondutividade (“precisamos de desenvolver magnetes!”) a mais altas temperaturas para reduzirmos a necessidade de Hélio, um recurso escasso. Falou-nos da Fotossíntese Sintética para reduzir o CO₂ a CO, recorrendo a energias renováveis, através da captura de CO₂ numa termoelétrica, por exemplo. Apelou ao encaminhamento de telemóveis para reciclagem, uma vez que uma tonelada de telemóveis reciclados permite recuperar 100 g de ouro, mas lamentou a falta de investimento na recuperação de outros elementos sem valor económico, que, apesar de escassos e valiosos em aplicabilidade e necessidade industrial, continuam a ser importados. Alertou, também, para o facto de que sem Terras Raras como o Neodímio e o Tântalo, provenientes da China e da Rússia, não teremos computadores, e que embora haja muitas no fundo do mar, “é melhor não ir por aí...”. Afirmou, ainda, que a Química poderá dar um grande contributo para a diminuição



Palestra do Prof. Adelino Galvão.

da desigualdade, repartindo recursos e levando os países ricos a assumirem despesas dos mais pobres.

Para além da promoção da consciência individual e social através do conhecimento científico interdisciplinar, este evento deu voz a um representante do poder local, o Eng. Hélder Costa, membro do Gabinete de Apoio à Presidência da Câmara Municipal de Braga. Apresentou-nos o Modelo Estratégico do Município de Braga para o Desenvolvimento Sustentável, saltando à vista a valorização da auscultação à população acerca dos temas por ela considerados mais relevantes, procurando dar resposta às suas aspirações, independentemente de políticas partidárias. Referiu que todas as empresas municipais de Braga desenvolvem o seu plano de ação com objetivos específicos dentro dos ODS. Que cerca de 2/3 das emissões de carbono globais são por conta das cidades, o que levou o município a estabelecer sinergias com o parque empresarial no que diz respeito aos transportes (procurando desfazer entre eles o horário de entrada na cidade, por exemplo), ao consumo de energia estacionária (garantindo acesso a energias renováveis), ao aumento da circularidade e à redução das desigualdades sociais. Partilhou algumas boas eco-notícias do município de Braga, como a recuperação de 89% dos resíduos gerados, o reconhecimento internacional da Universidade do Minho como uma das 100 melhores em matéria de sustentabilidade ambiental e a integração do município na Rede de Turismo Sustentável.

Coube-me apresentar um trabalho de projeto no âmbito da Literacia do Oceano, intitulado “Guardiões do Oceano”, em implementação na minha escola. Desenhado aquando da declaração pelas Nações Unidas da Década Internacional da Oceanografia para o Desenvolvimento Sustentável, 2021/2030, este projeto visa ampliar a cooperação interdisciplinar para a promoção dos 7 Princípios do Oceano, bem como interações respeitadas e construtivas entre cada aluno e o oceano global que querará proteger, levando-o a reconhecer a necessidade de diminuir-

mos o impacto das atividades do quotidiano sobre os ecossistemas marinhos.

Desencadeado a partir da preocupação com o estado atual do maior reservatório do planeta - que tem recebido dos continentes oito milhões de toneladas de plástico por ano (ONU) - o “Guardiões do Oceano” teve como inspiração um discurso do Secretário-Geral das Nações Unidas, António Guterres, que, em 2018, nos disse:

“É hora de perceber que, para alcançar os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável e os objetivos do Acordo de Paris sobre mudanças climáticas, precisamos urgentemente de uma ação coletiva para revitalizar o oceano. Isso significa encontrar um novo equilíbrio na nossa relação com o meio marinho.”

... e a Encíclica *Laudato Si'*, em que o Papa Francisco reconheceu que cada pessoa, no seu quotidiano, pode fazer a diferença e que as pequenas ações de cada um são potenciadoras de grandes ações. Nela, afirmou que:

“Uma ciência económica que, em vez de gerar riqueza, gera desigualdade, não pode estar bem. É preciso ter um propósito maior de contribuição para a sociedade.”

Além do clima, na *Laudato Si'* o Papa Francisco escreveu sobre a proteção do oceano, a poluição da água, as espécies ameaçadas, as flores-tas e os povos indígenas.

Reconhecendo que os padrões insustentáveis de produção e consumo da sociedade global, impulsionados pela tecnociência por vezes fora de controlo, estão a levar à degradação das relações humanas e da nossa casa comum, evidenciou-se a necessidade de investir num plano comum. Um pequeno passo está a ser dado com este projeto, no módulo 3C's - Cuidar da Casa Comum de uma disciplina oferecida às turmas de 7.º ano - *Tardes Magis*. Poderá, no entanto, adaptar-se a todas as faixas etárias.

Na impossibilidade de traduzir nestas linhas tanto saber partilhado nestes dois dias, impõe-se louvar a generosidade e dedicação de todos os palestrantes e a simpatia contagiante dos participantes que tornaram o evento memorável.

Não resisto em terminar com a *Química do Amor*, onde o Prof. Filipe Monteiro demonstrou que as mulheres têm maior sensibilidade olfativa do que os homens e que a atração é maior entre dois seres com maior diversidade genética por uma questão de fortalecimento da espécie, já que permite a geração de crias mais saudáveis e resistentes. “Acredita no amor à primeira vista ou terei de passar por aqui outra vez?” deixou clara a importância da Química no Amor.

>

Sílvia Sepúlveda

silvia.sepulveda@csjb.pt

XV Encontro Nacional de Química-Física / IV Simpósio de Química Computacional

Durante o passado mês de abril, nos dias 4 e 5, decorreu o XV Encontro Nacional de Química Física / IV Simpósio de Química Computacional, em formato *online*. Contou com 160 participantes que durante dois dias divulgaram e discutiram os seus trabalhos mais recentes.

O programa científico incluiu quatro sessões plenárias: Prof.^a Reiko Oda (IECB, *Université de Bordeaux-CNRS*, França), sobre transferência de informação quiral entre moléculas e objetos mesoscópicos; Prof. Michael Graetzel (*Swiss Federal Institute of Technology Lausanne*, Suíça), sobre células fotovoltaicas; Prof. Luis Arnaut (CQC, IMS, Universidade de Coimbra, Portugal), sobre práticas médicas emergentes da ciência fundamental; e Prof. Michele Parrinello (*Italian Institute of Technology*, Itália), sobre a aplicação de métodos computacionais ao estudo de processos catalíticos.

O Encontro contou ainda com quatro comunicações orais convidadas: Dr.^a Ermelinda Maçoas (IST, IMS, Universidade de Lisboa), sobre propriedades óticas e aplicações de nanomateriais de carbono OD; Prof. Paulo Ferreira (INL, IST, Universidade de Lisboa), sobre aplicação de microscopia eletrónica a materiais para baterias de lítio; Prof. Carlos M. Pereira (CIQ, IMS, Universidade do Porto), sobre interfaces eletroquímicas - dos fundamentos à aplicação; e Prof.^a Célia Guerra (AIMMS, *Vrije Universiteit*, Países Baixos), sobre estudos computacionais de ligações de hidrogénio.

Adicionalmente, 18 participantes tiveram oportunidade de apresentar comunicações orais. Estas



foram sempre muito participadas, com a audiência das lições plenárias, a rondar ou, a ultrapassar, sempre a centena de participantes.

As comunicações em painel (74 no total) foram apresentadas e discutidas através da plataforma *Gather*. O uso desta plataforma permitiu uma excelente interação entre os participantes, alguns dos quais referiram, posteriormente, que as respetivas apresentações tinham sido mais vistas e discutidas do que tipicamente acontece num encontro presencial. É ainda de destacar a atribuição de cinco prémios às melhores apresentações em painel, destinados a estimular boas apresentações científicas por parte de investigadores jovens.

A próxima edição do Encontro Nacional de Química Física /Simpósio de Química Computacional voltará à forma presencial, em Lisboa, em 2024.

> **Carlos E. S. Bernardes**
cebernardes@ciencias.ulisboa.pt

> **Hermínio P. Diogo**
hdiogo@tecnico.ulisboa.pt

> **João Paulo Leal**
jpleal@ctn.tecnico.ulisboa.pt

> **Manuel E. Minas da Piedade**
mepiedade@ciencias.ulisboa.pt

8.º Encontro de Químicos Jovens Portugueses (8PYChem)



Comissão organizadora do 8.º Encontro de Químicos Jovens Portugueses.

Entre 17 e 19 de maio de 2023 realizou-se na Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro o 8.º Encontro de Químicos Jovens Portugueses. Esta conferência multidisciplinar levou à cidade de Vila Real cerca de 150 participantes de diversos países, entre eles Portugal, Alemanha, Grécia, Espanha, França, Ucrânia e Canadá. A cerimónia de abertura contou com a presença da Sr.^a Secretária de Estado do Desenvolvimento Regional - Valorização do Interior, Professora Doutora Isabel Ferreira, pelo Excelentíssimo Senhor Reitor da UTAD, Professor Emídio Gomes e, em representação da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ), a Professora Marta Piñeiro. Na cerimónia de encerramento marcou presença a Professora Doutora Raquel Chaves, Presidente da Escola das Ciências da

Vida e do Ambiente da UTAD. O programa científico contemplou cinco comunicações plenárias, cinco *keynotes*, seis comunicações orais convidadas e um *workshop*. Dos trabalhos submetidos ao congresso, foram apresentadas 24 comunicações orais, 10 comunicações *flash* e 61 comunicações em painel. Foram atribuídos os prémios de melhor comunicação oral a Daniela Pinheiro da UTAD, melhor *flash* a Filipa Mandim do Instituto Politécnico de Bragança, e melhor comunicação em painel a Nélia Tavares da Universidade de Coimbra.

O congresso foi ainda palco do 2.º Concurso Nacional de Retrossíntese, onde foram apresentados os trabalhos das três equipas finalistas. O prémio foi atribuído à equipa Metil Etil Propil, constituída por Alexandre Felgueiras, Vitaliy Masliy e Zoe Arnaut da Universidade de Coimbra.

O prémio PYCA foi revelado durante o congresso. O prémio PYCA é atribuído pelo Grupo de Químicos Jovens (GQJ) da SPQ e visa promover a excelência da Química desenvolvida por Jovens Investigadores, com especial ênfase para o impacto desta Ciência na Sociedade. O prémio é atribuído de dois em dois anos (excepcionalmente, o deste ano ocorreu três anos depois do anterior) e destina-se a recém-doutorados com idade até 35 anos (inclusive), premiando o trabalho desenvolvido durante o Doutoramento. Esse trabalho deve ser colocado num contexto de divulgação científica de forma a demonstrar a capacidade do Jovem Investigador para comunicar a relevância do seu trabalho à Sociedade em geral. O vencedor desta edição foi o Doutor Pedro Brandão, pela sua tese intitulada “*Isatin and multicomponent reactions: Sustainable catalytic synthesis of novel bioactive oxindole derivatives*”, atribuída pelo Departamento de Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra (FCTUC) em fevereiro de 2022. O Doutor Pedro Brandão apresentou o seu trabalho sob a forma de



Vencedores do 2.º Concurso Nacional de Retrossíntese.

uma comunicação oral convidada no último dia do Encontro. Para além disso, terá a possibilidade de ver o seu artigo publicado no Boletim da SPQ, receberá a oferta de um ano de quotas da SPQ e um livro científico. Houve ainda espaço à atribuição de uma menção honrosa ao Doutor Bernardo Nogueira pelo seu projeto de Doutoramento “*Generation and characterization of novel materials exhibiting color polymorphism*”, realizado também no Departamento de Química da FCTUC. O premiado receberá um livro científico e a possibilidade de ver o seu artigo publicado no Boletim da SPQ.

O Porto de Honra e o jantar foram os eventos sociais escolhidos para confraternizar e divulgar a cultura gastronómica e enológica da região.



Pedro Brandão, vencedor do Prémio PYCA 2023.

- | | | | |
|---|---|---|---|
| > | Céu Sousa
ceusousa@utad.pt | > | Rui Sousa
rui.sousa@quimica.uminho.pt |
| > | Mariana Fernandes
mspf@utad.pt | > | Joana Madureira
joanamadureira@ctn.tecnico.ulisboa.pt |
| > | Vanessa Gomes
v.s.d.gomes@gmail.com | > | Carolina Jesus
carolinaajesus@gmail.com |
| > | Vânia Graça
vgraca@utad.pt | > | Rute Pereira
rute.pereira@ua.pt |

Simpósio Ibérico de Polímeros Orgânicos Funcionais (ISFOP2023)



A primeira edição do Simpósio Ibérico de Polímeros Orgânicos Funcionais (ISFOP2023) realizou-se nos dias 11 e 12 de maio na Universidade de Aveiro em colaboração com a Sociedade Portuguesa de Química. O simpósio centrou-se numa vasta gama de polímeros orgânicos funcionais, incluindo materiais poliméricos eletroativos, quirais, porosos (POPs, COFs) e de inspiração biológica (biopolímeros). O simpósio também explorou as propriedades fascinantes dos polímeros orgânicos e o seu processamento para aplicações energéticas, eletrónicas, biomédicas ou ambientais. Alguns dos temas abrangidos pelo simpósio foram: baterias orgânicas, fotovoltaicos e termoelétricos orgânicos, engenharia de tecidos, polímeros quirais e estruturas orgânicas covalentes (COFs).

Este simpósio serviu também para estimular a colaboração entre grupos de investigação de Espanha e Portugal. Alguns dos oradores convidados foram: Thomas Bein (Universidade de Munique, Alemanha), Rebeca Marcilla (IMDEA Energy, Espanha), Daniele Mantione (Polymat, Espanha), Nagore Ortiz-Vitoriano (CIC EnergiGUNE, Espanha), Mariano Campoy-Quiles (Instituto de Ciências dos Materiais de Barcelona, Espanha), João Mano (Universidade de Aveiro/CICECO, Portugal), Ester Vázquez (Universidade de

Castilla La Mancha/IRICA, Espanha), Ana Rita Duarte (Universidade Nova de Lisboa, Portugal), Carmen Freire (Universidade de Aveiro/CICECO, Portugal), Josep Puigmartí-Luis (Universidade de Barcelona, Espanha), Aurelio Mateo-Alonso (Polymat, Espanha), Laura Salonen (Universidade de Vigo/CINBIO, Espanha) e Félix Freire (Universidade de Santiago de Compostela/CIQUS, Espanha).

O simpósio contou com a presença de mais de 80 participantes que contribuíram com apresentações orais e sessões de *posters*. Foram também atribuídos cinco prémios aos melhores *posters* patrocinados pelo grupo GENAM da RSEQ, RSC Applied Polymers, Energy Advances e Reaxys. Todos os participantes salientaram o bom ambiente da conferência e a elevada qualidade das palestras.

Mais informações em isfop2023.events.chemistry.pt.

> **Manuel Souto**
manuel.souto@ua.pt



#GWB2023 – “Oceanos que Quebram Barreiras”



À semelhança do que aconteceu nos anos anteriores, a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) associou-se mais uma vez ao *Global Women's Breakfast 2023* com o tema “*Breaking Barriers in Science*”. Tendo a Organização das Nações Unidas definido o Ano Internacional das Ciências Básicas para a Sustentabilidade de 8 de julho de 2022 a 30 de junho de 2023, o programa do #GWB2023 em Portugal foi preparado em torno do tema “Oceanos que quebram barreiras” e unem povos, que é um tema congregador de todas as ciências básicas. Assim, convidámos toda a comunidade de químicos e não químicos, a associarem-se a este evento, que ocorreu a 14 de fevereiro.

A iniciativa desenvolveu-se de forma híbrida. Virtualmente, estabeleceu-se ligação por zoom com escolas, universidades, institutos, empresas e todas as pessoas que individual ou coletivamente quiseram participar, distribuídos por todo o país, tendo havido mais de 150 participantes. A sessão virtual começou com as boas-vindas a todos e com uma breve apresentação do programa do evento, disponível em spq.pt/news/global-womens-breakfast-2023. Logo de seguida, Adelino Galvão, o anterior Secretário-Geral da SPQ, encantou-nos com o tema “A água”, melhor dizendo “O oxidano”. Falou de uma forma alegórica sobre a água partilhando muito do saber sobre as suas propriedades, remetendo os ouvintes para bibliografia diversa e composições musicais relacionadas com a água. De seguida, fomos passando de escola em escola, de universidade em universidade/instituto para conhecermos muito do que se faz nos projetos educacionais e de investigação relacionados com os Oceanos e com a Sustentabilidade.

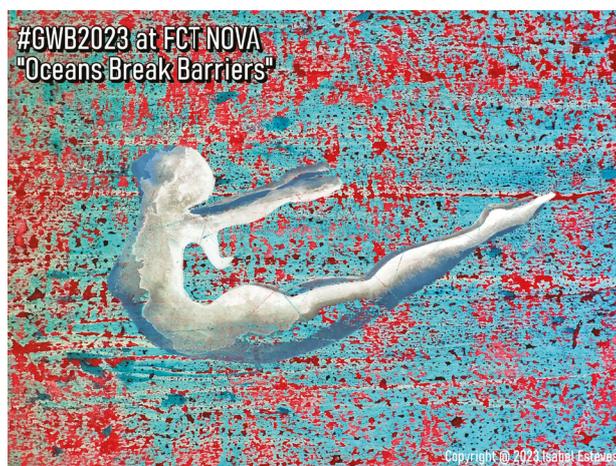
À semelhança do que acontecia nos anos anteriores à pandemia de COVID-19, o GWB 2023 foi também realizado presencialmente em muitas das instituições, tendo os participantes degustado excelentes iguarias tradicionais portuguesas. Por exemplo, na FCT NOVA, os mais de 60 participantes degustaram um maravilhoso “brunch” enriquecido com as ofertas da Vitacress, do Pingo Doce, e alguns doces regionais portugueses feitos pelos investigadores presentes. Como em anos

anteriores, Isabel Esteves, Professora e Investigadora da FCT NOVA, desenhou o cartaz alegórico.

No Departamento de Química da UC, a celebração do GWB 2023 foi realizada num pequeno-almoço partilhado que reuniu mais de 50 participantes, entre professores, investigadores e alunos. O convívio foi animado e permitiu a partilha de experiências entre gerações diferentes de investigadores. Os participantes foram desafiados a escolher três palavras sobre o que significava para eles “*Breaking Barriers in Science*”.

O GWB2023 terminou com um brinde envolvendo um doce regional e uma bebida e uma mensagem final de Artur Silva, ex-Presidente da SPQ, que registou com muito gosto a Direção terminar o seu mandato em tão boa companhia. Palestrantes e participantes, sentiram que mais uma vez a rede de contactos estabelecida no GWB2023 era um quebrar de barreiras e uma alavanca para futuras colaborações em projetos dedicados ao desenvolvimento de um mundo mais sustentável! Novamente, o GWB2023 da SPQ reuniu muitos corações no Mapa do Mundo, no site da IUPAC.

Parabéns a todos pelo fantástico evento *Global Women's Breakfast 2023* (#GWB2023)!



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

> **Maria Clara Magalhães**
mclara@ua.pt

> **Isabel Esteves**
i.esteves@fct.unl.pt

Meias-finais das Olimpíadas de Química 2023

Na edição das Olimpíadas de Química (Mais e Júnior) de 2023, jovens estudantes provenientes de todas as regiões de Portugal tiveram a oportunidade de demonstrar o seu conhecimento, habilidade prática e paixão pela Química, enfrentando desafios estimulantes, que exigiram raciocínio lógico, criatividade e um domínio sólido dos mais variados princípios químicos.

Meias-finais das Olimpíadas de Química Mais

As meias-finais das Olimpíadas de Química Mais decorreram a 11 de março de 2023 e tiveram lugar de norte a sul de Portugal Continental e nas ilhas, em várias instituições de ensino superior (IES), como a Universidade do Minho, o Instituto Politécnico de Bragança, a Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, a Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, a Universidade de Aveiro, a Universidade de Lisboa (Faculdade de Ciências e IST), a Universidade do Algarve, a Universidade dos Açores e a Universidade da Madeira.

Meias-finais das Olimpíadas de Química Júnior

As meias-finais das Olimpíadas de Química Júnior decorreram a 18 de março de 2023 em várias IES: Universidade do Minho, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, Universidade do Porto (Faculdade de Ciências e Faculdade de Engenharia), Universidade de Aveiro, Universidade de Coimbra, Universidade de Lisboa (Faculdade de Ciências e IST), Universidade do Algarve e na Universidade da Madeira.

Todos os resultados e classificações das meias-finais das Olimpíadas de Química estão disponíveis em olimpiadas.spq.pt.

>

Bruno Machado

brunofm@fe.up.pt

Final das Olimpíadas de Química Mais na Universidade de Aveiro

O Departamento de Química da Universidade de Aveiro acolheu no sábado, 6 de maio de 2023, 36 estudantes e 15 professores de Física e Química de 12 escolas secundárias do País que tinham sido selecionados nas meias-finais.

Esta iniciativa contou com o apoio da SPQ e com a participação do Núcleo de Estudantes de Química da UA que, coordenados pela Prof.^a Diana Pinto, Coordenadora Nacional das Olimpíadas de Química, têm levado por diante esta iniciativa. Contou, na sessão de abertura, com o Diretor do Departamento de Química, Professor Doutor Armando Silvestre, e o Vice-Reitor da Universidade de Aveiro, Professor Doutor Artur Silva.

Além das provas, que na Final Nacional são individuais e compostas por uma prova prática (realizada durante a manhã) e uma prova teórica (realizada durante a tarde) e do almoço oferecido pela Reitoria da Universidade de Aveiro, os participantes tiveram a oportunidade de visitar o Departamento de Química e conversar com licenciados em Química, Bioquímica e Biotecnologia, que recentemente ingressaram no mercado de trabalho. Tiveram desta forma oportunidade de



Os participantes, durante as provas.



Rodrigo da Silva Cordeiro Martins Sobral da Escola Secundária Adolfo Portela, Águeda (Medalha de Ouro).

esclarecer dúvidas sobre a importância de adquirir uma formação qualificada em Química.

O momento mais aguardado foi sem dúvida a entrega das medalhas aos vencedores e o lanche de convívio final oferecido pela SPQ.

Este ano, o prémio da **Melhor Escola** foi para a Escola Secundária Adolfo Portela, Águeda. Os estudantes premiados foram Sebastião Mendonça do Colégio Pedro Arrupe, Lisboa (**Medalha de Bronze**), Inês Alves Padrela Pinto Correia da Escola Básica e Secundária Carolina Michaëlis,

Inês Alves Padrela Pinto Correia da Escola Básica e Secundária Carolina Michaëlis, Porto (Medalha de Prata).



Sebastião Mendonça do Colégio Pedro Arrupe, Lisboa (Medalha de Bronze).



Porto (**Medalha de Prata**) e Rodrigo da Silva Cordeiro Martins Sobral da Escola Secundária Adolfo Portela, Águeda (**Medalha de Ouro**).

> **Diana Pinto**
diana@ua.pt

> **Amparo Faustino**
faustino@ua.pt

> **Carlos Silva**
csilva@ua.pt

> **Graça Rocha (fotografias)**
grrocha@ua.pt

Final das Olimpíadas de Química Júnior na Universidade do Minho



Sessão de abertura.

No passado dia 27 de maio, o Departamento de Química da Universidade do Minho, em colaboração com a SPQ, organizou a Final Nacional das Olimpíadas de Química Júnior 2023, que envolveu a participação de



1.º lugar - José António Figueiredo, Tomás Cadillon e Pedro Oliveira do Colégio D. Diogo de Sousa, Braga.



Os vencedores com a comissão organizadora e colaboradores.

20 equipas constituídas por alunos dos 8.º e 9.º anos de escolaridade, provenientes de escolas de norte a sul do País e Madeira, apuradas nas semifinais das Olimpíadas de Química Júnior em diversas universidades. A sessão de abertura contou com a presença da Pró-Reitora para a Comunicação, Teresa Ruão, do presidente da SPQ, Joaquim Faria, do presidente da ECUM, José Manuel Méijome, do diretor do Departamento de Química, Luís Monteiro, e Susana Costa, representante da organização.

Além das provas teórica e laboratorial realizadas pelas equipas participantes, o programa do evento incluiu as palestras “Ciência doméstica: uma curiosidade histórica no ensino da Química?”, apresentada por João Paulo André, e “Resíduos orgânicos: como transformar um problema em solução”, proferida por Fátima Bento.

Na sessão de encerramento, a comissão organizadora da final, constituída por Ana Paula Bettencourt, Manuela Raposo, Manuela Silva, Sílvia Lima e Susana



2.º lugar – Leonardo Sousa, Maria Domingues e Inês Ventura da Escola Secundária Pinhal do Rei, Marinha Grande.



3.º lugar – Vicente Nunes, Maddox Kuipers e Yazhi Xue do Colégio Salesianos do Estoril.

Costa, entregou os prémios aos vencedores: o **1.º lugar** foi atribuído aos alunos José António Figueiredo, Tomás Cadillon e Pedro Oliveira do Colégio D. Diogo de Sousa, Braga; o **2.º lugar** coube aos alunos Leonardo Sousa, Maria Domingues e Inês Ventura da Escola Secundária Pinhal do Rei, Marinha Grande; e o **3.º lugar** foi entregue aos alunos Vicente Nunes, Maddox Kuipers e Yazhi Xue do Colégio Salesianos do Estoril.

Muitos parabéns a todos os participantes.

>

Susana Costa

spc@quimica.uminho.pt

4.º Encontro dos Diretores das Revistas Associadas à *Chemistry Europe*



Decorreu na sede da Wiley-VCH, em Weinheim na Alemanha, nos dias 4 e 5 de maio de 2023, o *4th Meeting Editors-in-Chief of Chemistry Europe Membership Magazines/Newsletters*. Neste Encontro esteve presente o Professor Vasco Bonifácio, como Diretor-Adjunto do QUÍMICA. Foram discutidos diversos tópicos, entre eles os desafios da *Chemistry Europe* (Associação de 16 Sociedades Europeias de Química fundada em 1995) e a colaboração entre as revistas associadas, num total de 15. Decorreram igualmente diversos *workshops*, tendo num deles sido apresentado o QUÍMICA (em termos de perspetiva histórica, conteúdos, projetos inovadores e interação com a Sociedade). O encontro foi encerrado com um jantar com todos os Diretores presentes e os membros da Organização (Wiley-VCH).

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

Prémio Madinaveitia-Lourenço 2023 Atribuído a Artur Silva

O Prémio Madinaveitia-Lourenço de 2023 foi atribuído a Artur Silva, Vice-Reitor para a Investigação e investigador do Departamento de Química da Universidade de Aveiro (UA).

Este prémio Luso-Espanhol de Química, instituído em parceria pela Sociedade Portuguesa de Química e pela *Real Sociedad Española de Química*, é atribuído anualmente, e em alternância, a químicos portugueses ou espanhóis com projeção internacional. A escolha do premiado cabe à sociedade que atribui o prémio, que este ano foi a *Real Sociedad Española de Química*. A instituição deste prémio destina-se a recordar dois químicos notáveis: Antonio San Quintín Madinaveitia y Tabuyo (1890-1974) e Agostinho Vicente Lourenço (1822-1893).

A lista de todos os premiados pode ser encontrada na página da SPQ em spq.pt/premios/luso-espanhol/lista.



> **Bruno Machado**
brunofm@fe.up.pt

Prémio IUPAC 2023 Mulheres Notáveis em Química ou Engenharia Química

Para comemorar o Dia Internacional das Mulheres e Raparigas na Ciência a 11 de fevereiro, a IUPAC anunciou as premiadas do IUPAC 2023 Mulheres Notáveis em Química ou Engenharia Química. As galardoadas foram: Lidia Armelao (*National Research Council and University of Padova*, Itália), Annette G. Beck-Sickinger (*Leipzig University*, Alemanha), Chunying Chen (*National Center for Nanoscience and Technology of China*, Pequim, China), Bin Liu (*National University of Singapore*, Singapura), Laura McConnell (*Bayer U.S., Crop Science Division*, EUA), Marcia Foster Mesko (Universidade Federal de Pelotas, Brasil), Jyotirmayee Mohanty (*Bhabha Atomic Research Centre*, Mumbai, Índia), Tatjana Parac-Vogt (*Katholieke Universiteit Leuven*, Bélgica), Gill Reid (*University of Southampton*, Reino Unido), Mikiko Sodeoka (RIKEN, Japão), Nguyễn Thị Kim Thanh (*University College London*, Reino Unido) e Marinda Wu (Dow, aposentada, EUA).

Este prémio, iniciado como parte das celebrações do Ano Internacional da Química de 2011, foi criado para reconhecer e destacar o trabalho de mulheres químicas/Engenheiras Químicas em todo o mundo. Desde 2011, o prémio tem ganhado cada vez mais reconhecimento na comunidade global. As 12 premiadas foram selecionadas com base na excelência da sua investigação, fundamental ou aplicada, realizações notáveis no ensino ou

educação, liderança demonstrada ou excelência em gestão nas ciências químicas. A Comissão de Avaliação está particularmente interessada em candidatas com um histórico de liderança e/ou serviço comunitário ao longo das suas carreiras. A entrega dos prémios decorrerá durante o Congresso Mundial de Química da IUPAC, que será realizado em agosto de 2023.

Mais informações acerca deste prémio disponíveis em iupac.org/what-we-do/awards/iupac-distinguished-women.



> **Bruno Machado**
brunofm@fe.up.pt

Prémio Internacional IUPAC-Solvay para Químicos Jovens 2023

A União Internacional de Química Pura e Aplicada e a Solvay anunciaram os vencedores do Prémio Internacional IUPAC-Solvay para Químicos Jovens 2023 para as melhores teses de Doutoramento na área da Química, com base em textos de 1000 palavras. Os cinco vencedores foram:

- Dr. Eduard Bobylev (Ucrânia/Países Baixos), “*Spherical coordination-based M_nL_{2n} assemblies: Construction, confinement, catalysis and bio application*”, *University of Amsterdam*, Países Baixos;
- Dr. Craig Day (Canadá/Espanha), “*Understanding nickel catalysis at the molecular level: Insights into C-O functionalization and electron transfer events*”, *Rovira i Virgili University*, Espanha;
- Dr. Nikita Hanikel (Alemanha/EUA), “*Atmospheric water harvesting with Metal-Organic Frameworks*”, *University of California Berkeley*, EUA;
- Dr. Apurva Panjla (Índia), “*Therapeutic potential of short peptide conjugates as novel antibiotics and osteoinductive agents*”, *Indian Institute of Technology*, Kanpur, Índia;
- Dr. Yu Zheng (Pequim/China/EUA), “*Molecular design of polymer semiconductors for skin-inspired electronics*”, *Stanford University*, EUA.

Foram recebidas 58 candidaturas de pessoas que obtiveram o seu doutoramento em instituições de 21 países. A comissão de seleção, presidida pelo

Prof. Christopher Brett, antigo Presidente da IUPAC, foi composta por membros da IUPAC e um conselheiro científico sénior da Solvay, todos eles com uma vasta experiência em Química. Dada a elevada qualidade dos trabalhos, a Comissão decidiu também atribuir menções honrosas a:

- Dr. Yuanxin Deng (Pequim/China/Países Baixos), *University of Groningen*, Países Baixos;
- Dr. Karthick Govindan (Índia, Taipé/Taiwan/China), *Kaohsiung Medical University*, Taipé/Taiwan/China;
- Dr. Renyu Guo (Pequim/China/EUA), *Indiana University Bloomington*, EUA;
- Dr. Aron Peter (Hungria, Reino Unido), *University of Manchester*, Reino Unido.

Cada vencedor receberá um prémio em dinheiro de \$1000 e será convidado a apresentar um poster no 49.º Congresso Mundial de Química da IUPAC, que decorrerá em Haia, Países Baixos, entre 20 e 25 agosto de 2023. Os vencedores serão também convidados a apresentar um poster no Congresso da IUPAC descrevendo o seu trabalho premiado, e a submeter um artigo de revisão sobre os aspetos críticos do seu tema de investigação para ser publicado na revista *Pure and Applied Chemistry*. Os prémios serão entregues aos vencedores das edições de 2022 e 2023 durante a Cerimónia de Abertura do Congresso.

Mais informações disponíveis em iupac.org/winners-of-the-2023-iupac-solvay-international-award-for-young-chemists.

>
Bruno Machado
brunofm@fe.up.pt

Prémio Europeu de Química Sustentável 2023 Atribuído a Arjan Kleij

O Prémio Europeu de Química Sustentável, concedido pela Divisão da Química Verde e Sustentável da EuChemS a cientistas de excelência nesta área, tem como principal objetivo impulsionar esta área da Química. Pretende-se dar uma maior visibilidade ao esforço de cientistas europeus para a implementação da Química Verde no campo industrial e ser um motor para melhorar a inovação global e a competitividade.

O professor Arjan Kleij, do *Institute of Chemical Research of Catalonia (ICIQ)* com sede em Tarragona (Espanha), vê premiado o seu trabalho na área de utilização do CO₂ e especialmente a síntese e aplicações de carbonatos cíclicos.



O Prémio Europeu de Química Sustentável de 2023 será atribuído a Arjan Kleij na 6.ª Conferência EuChemS sobre Química Verde e Sustentável (6EuGSC), que será realizada de 3 a 6 de setembro de 2023 em Salerno, Itália (6eugsc.org).

>
Bruno Machado
brunofm@fe.up.pt

Prémios EFMC 2023 para Jovem Químico Medicinal ou Biólogo Químico

Para reconhecer a excelência de jovens químicos medicinais e biólogos químicos (≤ 12 anos após o doutoramento) que trabalham na indústria e na academia europeias, a EFMC estabeleceu o “Prémio EFMC para Jovem Químico Medicinal ou Biólogo Químico na Indústria” e o “Prémio EFMC para Jovem Químico Medicinal ou Biólogo Químico na Academia”. Os dois prémios são atribuídos anualmente e consistem num diploma, prémio em dinheiro de 1000 € e um convite para uma apresentação num simpósio da EFMC. Para a edição de 2023, os premiados estão convidados a fazer comunicações orais no IX EFMC *International Symposium on Advances in Synthetic and Medicinal Chemistry* (EFMC-ASMC 2023), que irá decorrer em Zagreb (Croácia), de 3 a 7 de setembro, 2023.

A comissão de seleção designou o Dr. Georg Winter (*Research Center for Molecular Medicine, CeMM, of the Austrian Academy of Sciences, Áustria*) como o vencedor do Prémio EFMC 2023 para Jovem Químico Medicinal ou Biólogo Químico na Academia e a Dr.ª Teresa De Haro Garcia (UCB, Bélgica) como a vencedora do Prémio EFMC 2023 para um Jovem Químico Medicinal ou Biólogo Químico na Indústria. O Dr. Marco Di Antonio (*Imperial College London, Reino Unido*) e a Dr.ª Valle Palomo (*IMDEA Nanociencia, Espanha*) foram reconhecidos como os segundos classificados mais meritórios na área da Academia e o Dr. Jean Baptise Langlois (Novartis, Suíça) e o Dr. Afjal Miah (GlaxoSmithKline, Reino Unido) foram reconhecidos como os segundos classificados mais meritórios na área da Indústria.



Georg Winter

Teresa De Haro Garcia

Georg Winter é Investigador Principal do CeMM especializado em biologia química e investigação sobre cancro. O foco do seu laboratório é o desenvolvimento de estratégias farmacológicas para compreender e interromper circuitos transcricionais aberrantes no cancro, utilizando tecnologias de alto rendimento. Georg é autor de mais de 40 artigos e recebeu vários prémios pelas suas contribuições para o campo da degradação direcionada de proteínas.

Teresa de Haro obteve o seu mestrado em Química na *Universidad Autónoma de Madrid* em 2007. Em 2012, recebeu o seu doutoramento da Universidade de Zurique com a Prof.ª Cristina Nevado, juntando-se posteriormente ao grupo do Prof. Alois Fürstner no *Max-Planck-Institut für Kohlenforschung* (Alemanha) como colaboradora pós-doutoral. Em 2013, mudou-se para o Reino Unido para trabalhar na Eli Lilly (Windlesham) antes de se juntar à UCB Slough em 2014. Desde 2018, Teresa de Haro trabalha como cientista principal na UCB Pharma (Bélgica).

Pode consultar a lista de todos os vencedores destes prémios em efmc.info/prizes.

>

Bruno Machadobrunofm@fe.up.pt

Publicação do Anuário EuChemS 2022

O Anuário EuChemS 2022, contendo as principais atividades desenvolvidas pela EuChemS ao longo do último ano, foi lançado no início de março.

Ao longo de 2022 foram várias as atividades científicas, de política científica e de comunicação científica que contaram com o apoio e a participação da EuChemS. O anuário inclui um resumo dos grupos consultivos relacionados com políticas e dos eventos organizados pela EuChemS. Os esforços da EuChemS para fortalecer a comunidade química europeia, principalmente através do 8.º Congresso de Química da EuChemS que se realizou em Lisboa, são também apresentados nesta publicação. Pode

descobrir mais sobre as iniciativas de comunicação científica da EuChemS nesta publicação, juntamente com os membros de 2022 do Conselho Executivo, Divisões, Sociedades Membros e Secretaria.

A produção do anuário foi coordenada pelo Secretariado da EuChemS, mas muitos outros membros da EuChemS contribuíram para garantir a alta qualidade e rigor da publicação.

O anuário de 2022 está disponível *online* em EuChemS.eu/2022-euchems-yearbok.

>

Bruno Machadobrunofm@fe.up.pt

Phosphorus (Entre Vénus e Lúcifer), de Manuel João Monte. A Química, Veículo de Cultura

>

Joaquim L. Faria

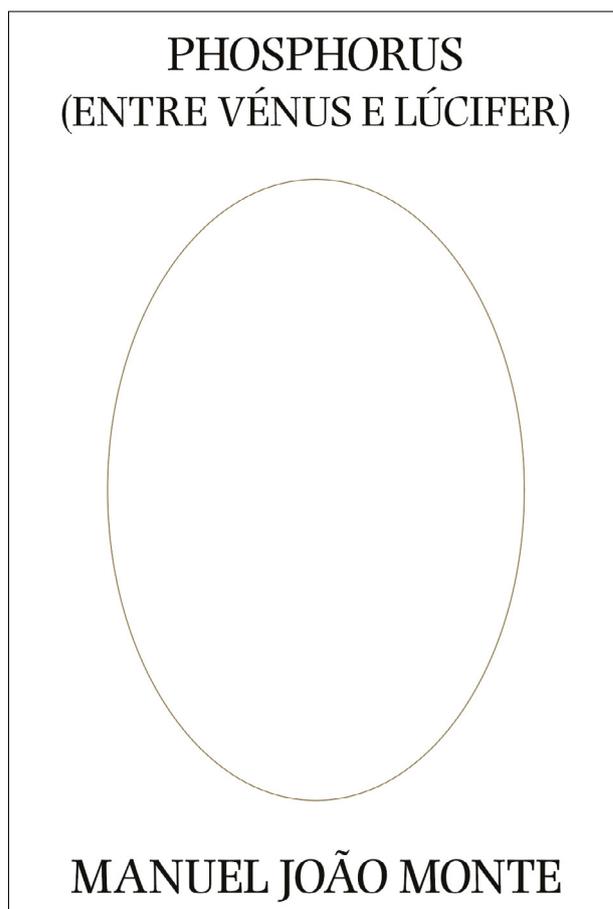
O termo “química cultural” pode soar estranho, mas ao contrário do que possa parecer não é uma invenção sofisticada dum era recente, em que tudo vale para atrair atenções e os termos, tal como *soundbites*, se inventam um pouco ao sabor das correntes.

A questão “O que é química cultural?” tem algum tempo e foi endereçada pela mão de Glen Wakeham [1] em 1938, como forma de protesto contra a noção complacente (até para a época) mantida por professores de química elementar, autoridades escolares, e até mesmo universitários, de que a química “cultural” consiste principalmente em falar sobre a química, e não na tentativa de levar o indivíduo (aluno, estudante, ou simplesmente um curioso) a uma compreensão da filosofia subjacente à química.

É precisamente neste contexto que a obra recente (embora tardia) de Manuel João Monte nos oferece, à custa de quadros vivos e pitorescos, uma reflexão madura sobre essa filosofia, que extravasa a Química e em muitos casos é mesmo uma filosofia de vida. Uma abordagem que visa não apenas entender a química como uma ciência isolada – a velha química da bancada e do tubo de ensaio –, mas a química moldada e influenciada por fatores sociais, políticos, económicos e ambientais, que pode ser utilizada para compreender e mesmo solucionar problemas culturais e sociais.

As peças de Manuel João Monte são verdadeiras viagens no tempo, em que o recurso a cruzar as linhas temporais, saltando entre o ambiente histórico e as questões prementes do nosso tempo, é utilizado com desenvoltura para nos manter agarrados ao desfiar do texto. Aliado a este recurso, está um uso bem medido de trocadilhos (neste caso, o paciente e o impaciente) e referências por vezes sub-reptícias, sempre bem-humoradas, que nos aгуezam o espírito para outros voos e outros cenários.

Desde *O Bairro da Tabela Periódica* (2019, Ano Internacional da Tabela Periódica) que a Sociedade Portuguesa de Química tem o privilégio de ser cúmplice na edição dos livros do Manuel João Monte. O lançamento de **Phosphorus (Entre Vénus e Lúcifer)**, em março de 2023, na Faculdade de Ciências da Universidade do



U.Porto Press, Coleção Fora de Série
ISBN-13: 978-989-746-345-7
Páginas: 180
Edição: março de 2023

Porto, no Auditório Ferreira da Silva, que exhibe muito apropriadamente o nome do nosso fundador, neste que é o ano da evocação do centenário do seu falecimento [António Joaquim Ferreira da Silva (28/07/1853 – 23/08/1923)], foi sem dúvida um momento memorável, ao juntar no espaço e no tempo estas referências.

Fiel aos propósitos do seu fundador, a SPQ assumiu nos últimos anos a enorme responsabilidade de contribuir ativamente para evolução do ensino da

Química em Portugal. Criou recentemente o Centro de Formação, colocando à disposição dos professores dos ensinos básico e secundário um conjunto de formações originais e contemporâneas. É também uma preocupação dessas formações que a química seja ensinada de uma forma genuinamente cultural, e que esse modo de ensino possa ser transposto para as salas de aula. Nesse aspeto, livros como **Phosphorus (Entre Vénus e Lúcifer)** são um veículo cultural original e genuíno que tardavam em aparecer. Agora que está

aí, só nos resta ser intoxicados pelos delírios fantásticos da descoberta alquímica daquela pedra que arde ao ar!

[1] G. Wakeham, *J. Chem. Educ.* **1938**, 15, 259-260. DOI: 10.1021/ed015p259.

>

Joaquim Luís Faria

Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto
jlfaria@fe.up.pt

António Jorge Andrade de Gouveia – Um Pedacoço de Química Portuguesa

>

Sérgio Rodrigues
Alberto Pais
Teresa Pinho e Melo
Ana L. Cardoso
Artur J. M. Valente

“O professor António Jorge Andrade de Gouveia (1905-2002) foi uma personalidade multifacetada, envolvida em diferentes atividades e contribuições para a investigação e ensino da Química, da Ciência, da História da Ciência e do governo universitário, como evocado pelos autores do presente volume. A comunidade química reconhece a sua contribuição para a Química, mas é a faceta de reitor da Universidade de Coimbra que é mais conhecida do público e é recordada no nome de uma rua, junto à placa da qual, crescia, há pouco tempo, um pinheiro. Trata-se de uma feliz coincidência, já que se trata de uma árvore cujos compostos estudou com mestria e diligência num tempo em que não estavam disponíveis os equipamentos que existem hoje. Equipamentos avançados com que Andrade de Gouveia sempre procurou equipar a Universidade de Coimbra.”

É desta forma que começa o posfácio que os autores deste texto escreveram para a publicação da presente obra de homenagem a Andrade de Gouveia. Entretanto, o pinheiro já cresceu mais um pouco. O subtítulo do livro, “Um pedacoço de Química Portuguesa,” pode causar estranheza ao público em geral, mas não a um químico. A superfície desse pedacoço pode ser fratal, tendo uma superfície quase infinita. Um grão de areia pode conter todo o mundo, como é dito no conhecido poema de William Blake. Os químicos habituados aos paradoxos moleculares e para os quais



António Jorge Andrade de Gouveia

um pedacoço é sempre suficientemente macroscópico para conter biliões de biliões de átomos podem ver o mundo nesse bocado. O livro é para os químicos, mostrando a centralidade da química, mas é também para um público mais vasto que queira saber mais sobre o homem e o reitor.

O livro abre com o prefácio de Sebastião Formosinho (1943-2016) e Hugh Burrows (1945-2023) que explicam a razão de ser da obra que se insere num programa mais vasto, para além do homenageado, e que é o empenho das direções do Departamento de Química em homenagear os seus professores por ocasião do centenário do seu nascimento. Esta homenagem, realizada no centenário do nascimento de Andrade de Gouveia, em 2005, levou vários anos até ser publicada, em 2022, na forma deste livro. Segue-se

um capítulo de autoria de Alves da Silva (1925-2016) que, com grande minúcia, acutilância e espírito, traça a biografia do homem de ciência que foi Andrade de Gouveia, desde a sua infância numa aldeia perto da Guarda, até ao final da sua vida. Esta biografia contém vários aspetos que permitem caracterizar melhor o seu tempo, a sua personalidade e as suas circunstâncias. Tem ainda alguns estudos complementares sobre lugares que conheceu e pessoas com quem privou. Este capítulo acabou por ser entregue pela sua viúva, Lídia Brandão, pois não estava ainda concluído na altura do seu falecimento. Sebastião Formosinho, no capítulo seguinte realça o papel de Andrade de Gouveia na estruturação e desenvolvimento da Escola de Química de Coimbra. É bastante interessante seguir essa análise para perceber como se investigava e publicava, na altura, em Química na Universidade de Coimbra. No capítulo seguinte, Victor Crespo (1932-2014) traça uma visão cosmopolita do governo das universidades públicas em diferentes países. Este capítulo, escrito ainda antes da implementação do processo de Bolonha, em 2006, permite uma comparação das universidades da altura. Segue-se um capítulo da autoria de Amorim da Costa que realça o homem das “duas culturas” que foi também Andrade de Gouveia. De facto, António Amorim da Costa foi também protagonista e testemunha, sobretudo a partir da década de 1960, dos interesses e realizações de Andrade de Gouveia no âmbito da História e Filosofia das Ciências e da vontade e prática da internacionalização desta área. Finalmente, há um capítulo de Augusto Correia Cardoso que realça a contribuição de Andrade de Gouveia para as edificações universitárias. O livro termina com um breve posfácio da autoria dos autores deste texto.

O Professor António Jorge Andrade de Gouveia (1905-2002) foi uma personalidade multifacetada envolvida em diferentes atividades e contribuições para a investigação e ensino da química, ciência e história da ciência e governo universitário, como evocado pelos autores do presente volume. A comunidade química reconhece a sua contribuição para a química, mas é a faceta de Reitor da Universidade de Coimbra que é mais conhecida do público. Esta obra traça um retrato vivo e profundo da sua vida e herança científica.

A imprensa da Universidade de Coimbra (IUC), contando com milhares de autores e títulos, fez no ano passado 250 anos da sua fundação. Não deixou, no entanto, de se modernizar e aderiu há algum tempo ao acesso aberto e os livros são indexados nas principais bases de dados. Esta obra pode ser obtida online no sítio da IUC (monographs.uc.pt/iuc/catalog/book/299). Embora também possa ser obtido em papel (livrariadaimprensa.uc.pt/produto/antonio-jorge-andrade-de-gouveia-um-pedaco-de-quimica-portuguesa/), o facto de estar integralmente *online* permite que seja acedido por um público alargado. É o que queremos: que Andrade Gouveia seja mais bem conhecido.



Imprensa da Universidade de Coimbra, Coleção Ciências e Culturas
 ISBN: 978-989-26-1807-4
 DOI: 10.14195/978-989-26-1808-1
 Páginas: 228
 Edição: outubro 2022

>

Alberto Pais

Departamento de Química da Universidade de Coimbra
pais@qui.uc.pt

>

Ana L. Cardoso

Departamento de Química da Universidade de Coimbra
ana.lucia.lobes@uc.pt

>

Artur J. M. Valente

Departamento de Química da Universidade de Coimbra
avalente@ci.uc.pt

>

Sérgio Rodrigues

Departamento de Química da Universidade de Coimbra
spjrodrigues@uc.pt

>

Teresa Pinho e Melo

Departamento de Química da Universidade de Coimbra
tmelo@ci.uc.pt

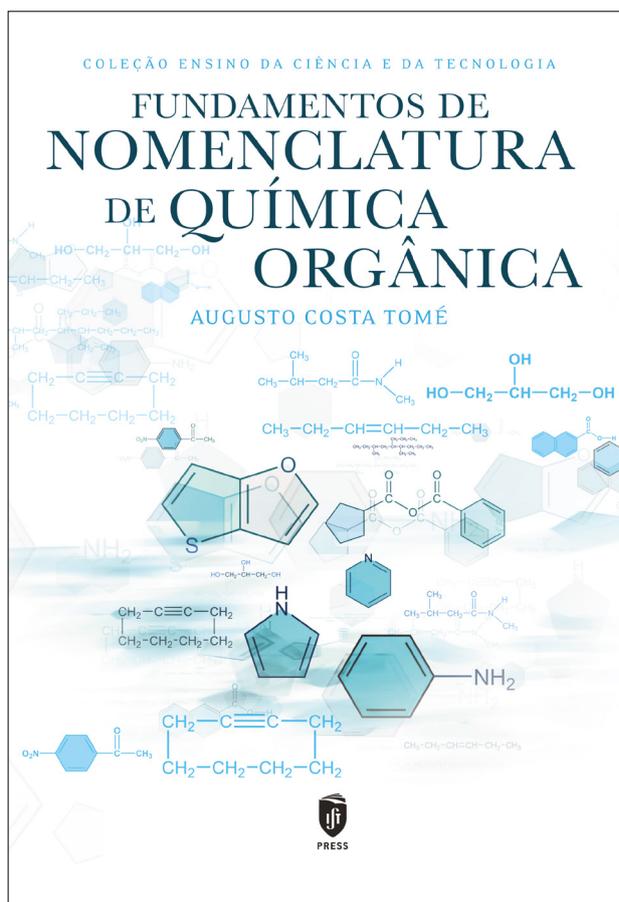
Fundamentos de Nomenclatura de Química Orgânica

Sobre o Livro

As designadas “regras de nomenclatura da IUPAC” são um conjunto diversificado de sistemas de nomenclatura que permitem atribuir nomes a compostos reais ou imaginários. Porém, a existência de vários sistemas de nomenclatura permite que, para o mesmo composto, possam ser atribuídos vários nomes, todos de acordo com as regras da IUPAC e, obviamente, todos aceites por esta organização. O “problema” da existência de nomes diferentes para o mesmo composto sempre existiu, mas as sucessivas atualizações das regras da IUPAC, com a adição de novas regras, têm vindo a aumentar a entropia! Esta situação levou a IUPAC a incluir nas Recomendações 2013 o conceito de “nome IUPAC preferido”, ou NIP, continuando, no entanto, a permitir o uso de nomes alternativos para um mesmo composto.

Neste livro apresentam-se, de forma rigorosa e sistemática, as regras mais recentes da IUPAC para a nomenclatura dos compostos orgânicos. É uma obra de carácter didático, onde cada regra é ilustrada com muitos exemplos práticos. Para cada estrutura, são indicados o nome IUPAC preferido e os outros nomes possíveis.

O livro destina-se a docentes, investigadores e estudantes do ensino superior, mas também será muito útil para os professores do ensino secundário e para quem precise de ter um conhecimento atualizado das regras da IUPAC.



IST PRESS, Coleção Ensino da Ciência e da Tecnologia

ISBN: 978-989-8481-96-2

Páginas: 245

Edição: março 2023

Sobre o Autor

Augusto Tomé é Professor Associado com Agregação no Departamento de Química da Universidade de Aveiro (UA). Obteve a licenciatura em Química, o doutoramento e a agregação na UA. Tem lecionado



Augusto Tomé

unidades curriculares na área da Química Orgânica e desenvolve investigação nessa área. É coautor de mais de 200 artigos em revistas científicas. É autor de livros de nomenclatura de Química Orgânica editados pela UA (1997 e 2004 (2.ª ed.)) e pela Escolar Editora (2010). Foi membro do Conselho Geral da UA (2017-2021), diretor do Departamento de Química (2011-2015) e presidente-adjunto do Conselho Pedagógico (2010). Foi presidente da Divisão de Química Orgânica da SPQ (2018-2020) e diretor da revista Química – Boletim da Sociedade Portuguesa de Química (2016-2019). É membro da IUPAC na *Chemical Nomenclature and Structure Representation Division (VIII)* desde 2020.

Galopim de Carvalho

– Uma Joia Portuguesa



António Marcos Galopim de Carvalho nasceu em Évora, em 1931. É licenciado em Ciências Geológicas pela Universidade de Lisboa (1959), doutorado em Sedimentologia (*3ème cycle*), em Paris (Sorbonne, 1964) e em Geologia pela Universidade de Lisboa (1969) onde, em 1975, realizou as provas de agregação. Lecionou durante 40 anos mais de uma dezena de disciplinas no Departamento de Geologia da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; entre 1965 e 1981 lecionou em Geografia, na Faculdade de Letras da mesma Universidade. Orientou projetos científicos, estudantes de mestrado e de doutoramento. Desenvolveu intensa e empenhada atividade na salvaguarda, valorização e classificação do Património Geológico, Paleontológico e Arqueológico Nacional. Tem uma vasta obra científica, pedagógica e de divulgação. Escreveu livros de memórias e de ficção. Marcos, seu nome artístico, aparece associado a obras de pintura e de escultura. Participou e continua a participar ativamente em conferências, colóquios, debates e séries televisivas de divulgação científica.

>

Interação Química com

Maria José Lourenço
mjlourenco@ciencias.ulisboa.pt

Galopim de Carvalho
galopim@sapo.pt

Durante 10 anos foi diretor do Museu Mineralógico e Geológico da Universidade de Lisboa (com início em 1983) e, depois, do MUHNAC - Museu Nacional de História Natural e da Ciência (com início em 1993). Trouxe, de Londres, ao MUHNAC, em finais de 1992, a primeira e grande exposição de Dinossáurios Robots, com um número de visitantes até então nunca alcançado, 346 694 visitantes, em onze semanas. Em maio de 1998, como diretor do MUHNAC, promoveu o *1st International Meeting on Dinosaur Palaeobiology*, evento de enorme destaque nacional e internacional com a participação de uma vintena de especialistas de projeção à escala mundial.

Iniciou em Portugal, em 1989, no MUHNAC, a *“Feira Internacional de Minerais, Gemas e Fósseis”*, com 35 edições concluídas, hoje alargada ao Porto, Coimbra e a outras cidades do país. Em 1994, o Presidente Mário Soares conferiu-lhe a insígnia de Grande Oficial da Ordem de Sant’Iago da Espada (Artes, Letras e Ciências) e, em janeiro de 2023, o Presidente Marcelo Rebelo da Sousa, a de Grande-Oficial da Ordem de Instrução Pública.

Jubilou-se como Professor Catedrático, em 2001. Foi o mentor do Museu do Quartzo, inaugurado em 2012, com a designação de Centro de Interpretação Galopim de Carvalho.

É patrono da Escola Básica 2,3 Professor Galopim de Carvalho, em Pego Longo, Sintra (1999), do Agrupamento de Jardins de Infância e Escolas Professor Galopim de Carvalho, de Queluz (2002), e da Escola Básica Galopim da Carvalho, em Évora (2004).

Em 2019 recebeu o doutoramento *Honoris Causa* pela Universidade de Évora.

O Professor Galopim de Carvalho não precisa de apresentações. É uma joia de pessoa. Conquistou o carinho de todos nós. É um Homem de afetos. Caracterizado pelo seu humor muito peculiar, sabedoria, de enorme generosidade e com uma jovialidade muito evidente. Admite ter sido um traquinas quando era rapazote! Aos 91 anos sente-se novo, apesar de referir que o corpo lhe dá sinais de algum cansaço. Comunica com todo o Mundo, dá aulas por ZOOM e admite que os comentários que recebe no Facebook lhe massajam o ego! Dinamizador de uma cidadania responsável, participante e cientificamente informada, permite ser caracterizado de ativista. Transborda de alegria com as homenagens e nestas ocasiões espalha uma enorme simpatia entre todos. Aconteceu recentemente com a inauguração do mural pintado pelos alunos no Agrupamento de Escolas Fernão do Pó no Bombarral, “Aos ombros do Gigante” no Pavilhão do Conhecimento e na condecoração, pelo Presidente da República Marcelo Rebelo de Sousa, com as insígnias de Grande-Oficial da Ordem da Instrução Pública, ordem honorífica que reconhece a dedicação à causa da educação e do ensino. O seu entusiasmo na divulgação de ciência é contagiante e admite que faltam muitos professores realizados: *“afinal os garotos passam mais tempo na escola com os professores do que com os pais”*. Pretende despertar nos mais novos a curiosidade necessária para tornar os estudos agradáveis. “Conversas com o Professor Galopim de Carvalho” transmitidas através da página YouTube do MUHNAC - Museu Nacional de História Natural e da Ciência, em Lisboa, promovem a compreensão pública sobre a CIÊNCIA, valorizam o património universitário e despertam a curiosidade do público em geral. A Química é uma das “personagens” que intervém em muitas destas lições e vale a pena rever.

Foi num dia de muita chuva que amavelmente me recebeu em Lisboa, na sua casa, acompanhado pela sua querida Isabel a quem muito carinhosamente chama Mãe.

O que mais o caracteriza?

A persistência no trabalho e nas lutas cívicas que travei, a frontalidade, a humildade, a lealdade e a afetividade.

Ao longo da sua vida qual foi o seu maior contributo?

Formar geólogos e professores de Geologia e lutar pela valorização e defesa do nosso património geológico. Divulgar, não só a ciência que cultivei, mas também o muito que a vida me ensinou.

Como pode caracterizar a sua infância e adolescência? Como passou a sua juventude?

Eu fui o quinto filho de seis (comigo eram três rapazes

e três raparigas). O meu Pai era escriturário; era manga-de-alpaca, como se dizia. Não fumava e não era consumidor de álcool. Trabalhava numa companhia de seguros, A PÁTRIA - Companhia Alentejana de Seguros. Numa fase na nossa vida, uns de nós crianças, outros adolescentes, diariamente, depois do jantar e durante uma meia hora, o Pai costumava ler-nos livros à mesa. A Mãe, doméstica, fora costureira de fatos de homem; deitar os filhos, senti-los a dormir e ficar, finalmente, com o tempo para si, entregue à costura, serão adentro até às tantas, foi sempre a melhor parte dos seus dias. Lembro-me da minha tia Cecília, irmã da minha Mãe que, tendo enviuvado, veio para nossa casa ajudar a tratar da ranchada de filhos! A minha Mãe faleceu em 1966 e o meu Pai em 1968.

Andei no Liceu em Évora. Posso dizer que não era bom aluno. Na escola primária detestava fazer cópias, apanhava reguadas e odiei esses professores. Achava a escola desinteressante e demasiado severa. Na escola dos Salesianos, para onde corria muitos domingos de manhã, o ambiente era bem diferente. Os padres jogavam à bola connosco.

No liceu havia um professor para cada disciplina e já não havia reguadas. O Reitor era rigoroso no que dizia respeito à disciplina. Um dia, depois de uma qualquer asneira que fiz, fui chamado à sua presença. O castigo, felizmente, não passou de uma firme admoestação. Mais que ouvi-la e aceitar o aviso, a minha atenção e os meus olhos estavam fixados naquele grande anel com uma vistosa pedra azul (uma safira sintética). Era sabido que, quando ele rodava a pedra do anel para a parte de dentro da mão, o infeliz levava um tabefe, à velocidade de um raio.

O final do primeiro ciclo do Liceu não me correu bem e acabei por não ter nota para ir ao exame do 3.º ano. Ao fim da tarde de cada dia, ia para casa da Isabel (Isabel Fialho, a minha mulher), minha condiscípula, à espera dos apontamentos que ela trazia das aulas, para conseguir estudar e propor-me a exame. Acabei por estudar sozinho e passei! No final do segundo ciclo aconteceu-me o mesmo. Acabei também por estudar sozinho e venci mais este obstáculo. Habituei-me a lutar pelo que queria.

Em miúdo tínhamos liberdade para andar na rua. Muito mais do que a escola, interessavam-me os trabalhos dos artesãos. Como rapaz a brincar aos crescidos, fui aprendiz de muitos ofícios, com destaque para os de carpinteiro, com o mestre Roberto, de sapateiro, na oficina do meu tio Almaça. Fui ajudante de caixeiro, na mercearia do Anselmo e fiz queijos de leite de ovelha, na francela de uma tia-avó. Gostava de acampar, de sentir a Natureza e de conviver com os camponeses. Tenho memórias felizes da gastronomia alentejana, da matança do porco e dos enchidos, do lume de chão, do cheiro a café de cevada, do candeeiro a petróleo da casa da minha avó. Não havia

“

A Sociedade anda distraída a ultrapassar a sustentabilidade do Planeta e receio que irá fazê-lo até ao esgotamento dos recursos minerais e ao envenenamento da água e dos solos.

os congelados, os enlatados, o *fast food* e o *takeaway* dos dias de hoje. A rádio, a televisão, o telemóvel, o computador, o micro-ondas e o frigorífico não fizeram parte da minha juventude.

Foi o tempo das barracas com alumínio passaram a ser a grande atração das feiras em todo o país. Vendiam tachos e cafeteiras, entre outros utensílios domésticos. Com a descoberta e com o isolamento do alumínio, a partir do bauxito, um depósito sedimentar essencialmente constituído por hidróxidos deste metal, o terceiro elemento mais abundante na crosta terrestre logo a seguir ao oxigénio e ao silício, havia um grande potencial para este fabrico.

Vim a Lisboa, de comboio, pela primeira vez em janeiro ou fevereiro de 1945. Estava frio! Foi um deslumbramento. As avenidas, os prédios altos, os carros elétricos... Na travessia do rio, entre o Barreiro e Lisboa, julguei ter visto o mar, tal a impressão que deu ter visto, pela primeira vez, tanta água.

O meu professor de Ciências Naturais, Cassiano Vilhena de seu nome, foi o meu mentor e deu rumo à minha vida como profissional. Em casa já colecionava pedras em caixas de sapatos debaixo da cama, mas não sabia classificá-las, nem conhecia as suas naturezas. Naquela altura existiam aproximadamente 100 minas em Portugal e era costume oferecerem amostras aos Liceus. No laboratório de Ciências Naturais havia dois caixotes, de há muito esquecidos, cheios de pedras enroladas em velhos jornais. O professor Cassiano pediu-me que o ajudasse a fazer uma coleção, que ele disse ser didática.

A minha ajuda foi lavá-las, uma a uma, e, depois de ele as classificar e de me ensinar o que eram e para que serviam, arrumá-las e juntar-lhes uma etiqueta, que escrevia com a melhor caligrafia que me era possível. Volframite da Borralha, magnetite do Marão, galena de Terramonte, pirites de São Domingos e de Aljustrel, mármore de Vila Viçosa, basalto de Lisboa entre muitas outras. “Com o professor Cassiano as rochas deixaram de ser pedras inertes, sem história,



D. Isabel Fialho, esposa, aos 15 anos e Galopim de Carvalho, com 26 anos.

e os respetivos exemplares arrumados em tabuleiros e armários de serviço às aulas, passaram a ser vistos como documentos da evolução do nosso planeta. Com ele aprendi o significado dos fósseis no conhecimento da história da vida e que as diferentes paisagens, na sua imensa biodiversidade, têm por suporte o solo e que este não é mais do que a capa superficial das rochas, alterada pelos agentes atmosféricos, capa essa necessária à fixação das plantas” [1].

Fazendo aqui um parêntesis na nossa conversa, referiu por diversas vezes que as minas abandonadas representam cicatrizes na paisagem. Com a escassez e indisponibilidade de recursos minerais, o que antevê vir a acontecer no futuro?

A Sociedade anda distraída a ultrapassar a sustentabilidade do Planeta e receio que irá fazê-lo até ao esgotamento dos recursos minerais e ao envenenamento da água e dos solos. Talvez em dois ou três séculos este cenário aconteça. Ficará a biodiversidade mais resistente; os ricos e os pobres serão tratados por igual; um diamante valerá menos do que um copo de água. Nas primeiras etapas da vida, o oxigénio não fazia parte da atmosfera. Ele seria letal para a vida de então, baseada num processo bioquímico realizado na ausência de oxigénio, conhecido por fermentação e que consiste na síntese de ATP (trifosfato de adenosina) no envolvimento da cadeia respiratória, etapa característica do processo de respiração celular. As histórias da Terra e da Vida ensinam-nos a compreender e ver melhor o futuro.

Quando veio para Lisboa? Onde morava?

Em 1950 vim para Lisboa estudar Biologia, por vontade do meu Pai, na Faculdade de Ciências (FC). Morava num quatinho. Foram dois anos a frequentar um curso que não me dizia nada e estampeei-me. O que eu queria mesmo era frequentar Geologia!

Entretanto a tropa chamou-me para Vendas Novas. Fui cadete durante seis meses. Aspirante em Évora

com 1800 escudos de ordenado (nove euros); passei a alferes e depois a tenente e tinha a namorada (a minha Isabel) em Évora! O que podia ser melhor? Como os militares não queriam milicianos durante muito tempo, mandaram-me embora. Então regresssei a Lisboa para trabalhar, fiz-me trabalhador-estudante e finalmente, em 1957, matriculei-me em Geologia (Ciências Geológicas). Naquele tempo, face à hipócrita moral vigente, era impensável virmos os dois para Lisboa ainda na condição de namorados. Esclareça-se que namorados nesse tempo não eram os namorados de hoje. Só havia liberdade para conversar. Beijinhos só às escondidas. Era por isso que a palavra namorado era sinónima de conversado.

O meu Pai pediu, então, a Isabel em casamento e, assim, ela já pôde vir para Lisboa, "sem dar que falar às bocas do mundo". Já estava comprometida e, assim... assim, já se podia "fechar os olhos". Matriculou-se no curso para formação de professores de ensino especial, no Instituto António Aurélio da Costa Ferreira. Casámos em dezembro de 1957.

Terminei o curso de Geologia em 1961, com boas notas e sem interrupções. Fui logo convidado para assistente pelos professores Torre de Assunção e Carlos Teixeira (que viria a ser meu orientador de doutoramento).

“ A Química é um eixo do estudo para a compreensão de quase tudo.

Na faculdade, quais os professores que o marcaram?

Destaco o Professor Torre de Assunção, pelas qualidades científicas, pedagógicas, culturais e humanas, o Professor Carlos Teixeira, pela dedicação, quase obsessão, pelo trabalho e pela defesa intransigente da Geologia e da profissão de Geólogo e a Professora Marieta da Silveira, da secção de Química Orgânica. Destaco, ainda, o Professor de Geografia, da Faculdade de Letras, Orlando Ribeiro que, não sendo geólogo, foi meu principal mentor, pela visão humanística da CIÊNCIA, pelo rigor e elegância do discurso falado e escrito.

Quais as disciplinas de que mais gostava?

Geomorfologia e Sedimentologia.

Para si o que é a Química?

Como sedimentólogo e geomorfólogo que procurei ser, o recurso à Química foi uma constante. Estudar meteorização das rochas e génese e evolução dos solos exige conhecimentos em diversos domínios desta CIÊNCIA, com destaque para a hidratação, a hidrólise, a cheluviação, a oxidação-redução, química e cristalocímica dos minerais envolvidos, etc. A Química é um eixo do estudo para a compreensão de quase tudo.

“ É preciso dar valor à Química!

Que publicações podemos destacar?

Carvalho, A.M.G. (1967). Significado Geológico dos Minerais das Argilas. *Naturália*, Revista da Sociedade Portuguesa de Ciências Naturais, 9(3-4): 22 + 1 p.

Lapa, A.J.R. e Carvalho, A.M.G. (1967). Lições sobre Mineralogia e Geologia das Argilas. *Naturália*, Revista da Sociedade Portuguesa de Ciências Naturais, 9(3-4).

Como é que a Química entrou na sua vida?

Não foi da melhor maneira. Na FC tive como Professor o Doutor Dom António Pereira Forjaz, um enfatuido "poseur" que detestei. Chamávamos-lhe o "Bi Dom", porque dizia-se que era Dom por parte do pai e Dom por parte da mãe. O homem era mesmo execrável! Eu tinha um primo camionista. Um dia convidei-o para assistir a uma aula deste professor. O meu primo confirmou o que eu já lhe tinha dito. Não dava para acreditar! Mas a Professora Marieta da Silveira, pelo contrário, era uma simpatia e belíssima profissional. O alemão Kurt Jacobsohn, professor de Química Orgânica, tinha mau carácter. Eu já era um simples assistente no Curso Geral de Mineralogia e Geologia quando este professor, sem respeito por ele nem por mim, procurou "meter-me uma cunha" a favor de um aluno, filho de um amigo. O rapaz não sabia nada e, como não podia deixar de ser, chumbou. Este catedrático deixou de me falar por um ano. E pergunta-se: porquê um ano? Porque, no ano letivo seguinte, o sem-vergonha, voltou a fazer-me o mesmo pedido. Perplexo e com todo o respeito disse-lhe: - «Senhor professor, se o rapaz souber para passar, passará, com toda a certeza. Se não souber, chumba outra vez». Foi o fim do nosso precário relacionamento. Nunca mais nos falámos, nem ele a mim, nem eu a ele. Diga-se que o rapaz estava bem preparado e passou...

A imagem da Química nos dias de hoje não é nada favorável. Porquê?

A este propósito só me ocorre dizer que a incultura científica dos portugueses é uma das nossas características. Não nos falam muito sobre os benefícios desta Ciência fantástica! Só conseguem divulgar facilmente os seus poucos malefícios. É preciso mostrar desde muito cedo aos mais novos a versatilidade e importância crucial da Química no bem-estar da Sociedade e no suporte, nos alicerces que ela oferece às outras Ciências. É preciso dar valor à Química!

“

Ensinei sempre com muito entusiasmo e alegria tudo o que sabia, conduzindo os alunos a verem interesse e beleza nas matérias, a desenvolverem autoestima e a interiorizarem o dever cívico de estudar.

E as moléculas e os átomos?

Trato-os com muito respeito. Estão na base de quase tudo o que estudamos. Estão na mineralogia, na cristalografia estrutural, na cristalochímica e na Geologia isotópica. Estão na alteração das rochas, na génese e evolução dos solos, na diagénese, no metamorfismo e no magmatismo.

E quem são os seus químicos de referência (nacional ou internacional)?

A nível nacional, não tenho. Apenas me lembro dos nomes de alguns professores, nem sempre pelas melhores razões. A nível internacional apenas tenho em mente os nomes mais sonantes, como Mendeleev, Lavoisier, Boyle, Dalton, Marie Curie, Priestley e pouco mais.

Quando é que os produtos químicos entraram nos seus trabalhos e artigos científicos?

Logo que iniciei funções como Assistente, comecei a trabalhar no laboratório de sedimentologia, sob a orientação do Professor Carlos Romariz. Usei, anos a fio, ácido clorídrico para dissolver rochas carbonatadas e separar os insolúveis (argilas, silte e areias), ácido fluorídrico para dissolver rochas siliciosas, hidróxido de amónio, peróxido de hidrogénio, hexametáfosfato de sódio, bromofórmio, entre os mais comuns.

E num laboratório de química qual é o maior fascínio? E o que é que mais o irrita?

Tudo me fascina! E não tenho ideia de algo que me irrite.

Como se tornou professor?

Verdadeiramente só depois do meu doutoramento. Segui o lema dos geólogos: *mens et malleus* (expressão latina que quer dizer mente e martelo). *Mens* alude à racionalidade que deve presidir ao pensamento científico e *malleus* designa a ferramenta mais usada por estes profissionais no seu trabalho de campo. Na docência inspirei-me no Professor Torre de Assunção, no modo de ensinar e de avaliar os alunos. Ensinei sempre com muito entusiasmo e alegria tudo o que sabia, conduzindo os alunos a verem interesse e beleza nas matérias, a desenvolverem autoestima e a interiorizarem o dever cívico de estudar.

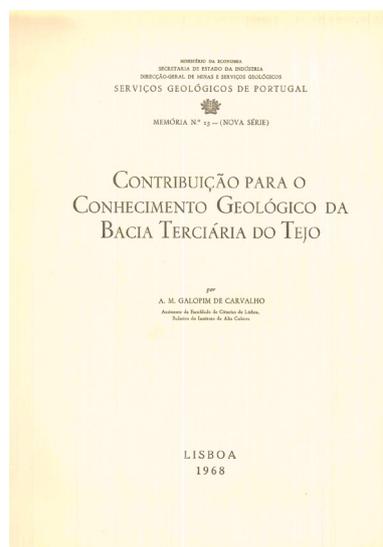
Quando surgiu o seu primeiro artigo científico?

Em 1959: “Malacostráceos das formações glauconiosas do Miocénico superior do litoral a norte do Cabo Espichel”. Foi um estudo de paleontologia de um tipo de crustáceos (vulgo caranguejos), contidos num sedimento rico em glauconite, um aluminossilicato hidratado de ferro, magnésio, sódio e potássio.

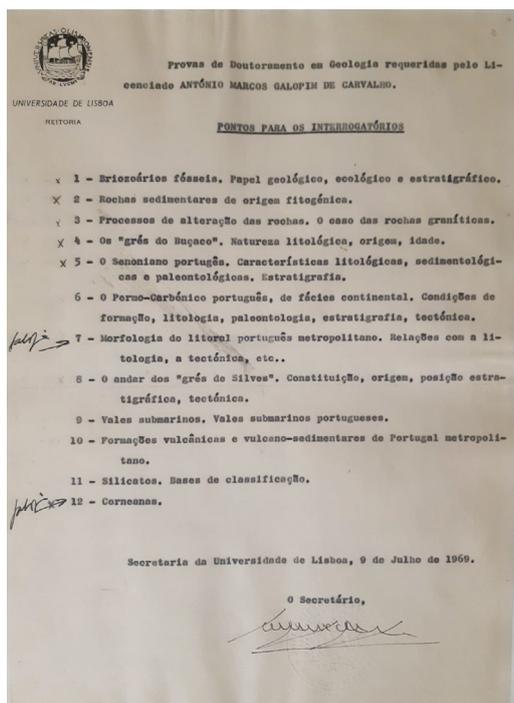
O que descobriu durante os estudos para o seu doutoramento?

O essencial deste estudo foi contribuir para o conhecimento de uma parte da Geologia portuguesa no que concerne à história da grande Bacia Ceno-Antropozóica do Baixo Tejo. Como descobertas, digamos que descobri a existência de dois tipos de argila, a *palygorskite* (ou *paligorskite*) e a bentonite. Neste estudo existe uma necessária interação entre a Geologia e a Química, sobretudo no que concerne à alteração de minerais e rochas, a sedimentação e a diagénese. Ainda hoje este meu trabalho é válido, o que é muito gratificante.

Comecei por me doutorar em Sedimentologia (*3ème cycle*), em Paris, na Sorbonne, em 1964. Regressei à pátria com meio caminho andado para o doutoramento em Geologia pela Universidade de Lisboa que vim a concluir tranquilamente, em 1969. Nestas caminhadas tive sempre a companhia da Isabel.



Capa da Memória dos Serviços Geológicos de Portugal N.º 15 (1968*), correspondente à publicação da tese de Galopim de Carvalho, datada de 1969. * Deve ler-se 1969 (1968 foi um erro da gráfica).



“Pontos para os interrogatórios” nas provas de doutoramento em Geologia de Galopim de Carvalho.

Análise térmica diferencial da fração argilosa de sedimentos da margem direita da Bacia do Tejo; realizado no Centro de Estudos Geográficos de Lisboa, Faculdade de Letras.

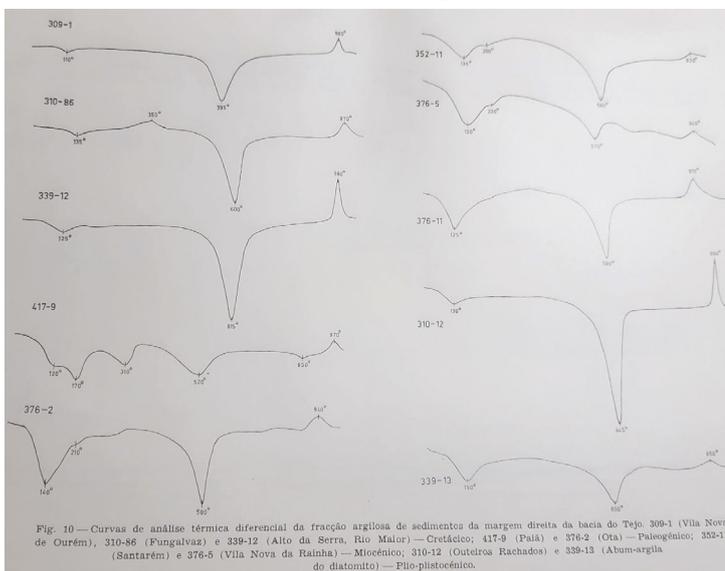


Fig. 10 — Curvas de análise térmica diferencial da fração argilosa de sedimentos da margem direita da bacia do Tejo. 309-1 (Vila Nova de Ourém), 310-86 (Fungalvaz) e 339-12 (Alto da Serra, Rio Maior) — Cretácico; 417-9 (Palá) e 376-2 (Ota) — Paleogénico; 352-11 (Santarém) e 376-5 (Vila Nova da Rainha) — Miocéneo; 310-12 (Outeiros Rachados) e 339-13 (Abum-argila do diatomito) — Plio-plistocénico.



Galopim de Carvalho no dia da defesa da sua tese de doutoramento, na sala de atos da Reitoria da Universidade de Lisboa, a 8 outubro de 1969.



Júri das provas de doutoramento de Galopim de Carvalho, na sala de Atos da Reitoria da Universidade de Lisboa, 1969. Na fila da frente (da esquerda para a direita): Orlando Ribeiro (Faculdade de Letras de Lisboa, Geografia), João Carrington da Costa (Professor Jubilado da Universidade do Porto, Geologia), Kurt Paul Jacobsohn (Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Química), Fernando Carvalho Barreira (Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Química), Germano da Fonseca Sacarão (Faculdade de Ciências

da Universidade de Lisboa, Zoologia), Miguel Montenegro de Andrade (Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Geologia) e Carlos Teixeira (Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Geologia). Na fila de trás, que eu me lembre, da esquerda para a direita, os professores da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa: António Almeida Costa (Matemática), Carlos Torre de Assunção (Mineralogia), José Tiago de Oliveira (Matemática), Professor José Gomes Ferreira (Física), Fernando Dias Agudo (Matemática) e Professor...? (Física?).

Nos meus trabalhos de doutoramento houve uma forte contribuição para o conhecimento geológico da região de Ponte de Sor. A ribeira de Sor representa um vale em cujas margens (especialmente na esquerda) podemos observar o enchimento da Bacia do Tejo. Foi este embrião que deu origem ao meu doutoramento.

Depois de dias longos passados no campo em observações e recolha de amostras, era na Pensão de Ponte de Sor que alunos e professores (os meus orientadores incluídos) jantavam juntos numa verdadeira reunião fraterna.

Tive dois orientadores: um Geólogo tradicional, professor Carlos Teixeira da FC, e um Geomorfólogo, professor Orlando Ribeiro de Geografia Física da Faculdade de Letras.

Nesse tempo recorria-se à análise térmica diferencial da fração argilosa de sedimentos. Esta técnica mostrou-se muito útil na comparação entre as diferentes amostras

e na caracterização dos diferentes intervenientes do ponto de vista físico-químico (perda de água, oxidação de matéria orgânica, decomposições, mudanças de fase, entre outras alterações).

Nos dias destinados às provas de doutoramento como se defendeu? Quem foram os arguentes?

Consegui 19 valores. As provas demoravam dois dias. O primeiro dia consistia nos interrogatórios: de duas questões tiradas à sorte de entre 12 dadas a conhecer com um mês de antecedência. No segundo dia era a discussão da tese. Os arguentes foram o Professor Carlos Teixeira e o Professor Orlando Ribeiro. Terminei



Angola (1976) - pintura de Galopim de Carvalho.



Escultura em pedra realizada por Galopim de Carvalho, no Ar.Co, orientado por Graça Costa Cabral e Sérgio Taborda. Representação de uma amonite com uma falha inversa e desligante direita (1989).

“

... o Laboratório Chimico da Escola Politécnica é atualmente um lugar de sonho para estudar química.

as provas a 8 de outubro de 1969 e até houve notícias em vários jornais: “Novos Doutores em Ciências”, pois o Rosa Taborda de Matemática terminou o seu doutoramento no mesmo dia.

Havia uma galeria de professores. Só homens! Kurt Paul Jacobsohn, vice-reitor e presidente do júri, João Carrington Simões da Costa (Professor Jubilado da Universidade do Porto), João Manuel Cotelto Neiva e José Marques Correia Neves (Universidade de Coimbra), Miguel Montenegro de Andrade (Universidade do Porto), nomeados por Portaria de 12 de junho de 1969, Diário do Governo, e restantes Professores Catedráticos da FC.

O que é que a Universidade tem de melhor?

Fonte inesgotável de saber!

Para além da vida académica que outras atividades lhe agradam?

Escultura e pintura que deixei quando comecei a escrever ficção. Tirei um curso de escultura no “Ar.Co” com Graça da Costa Cabral. Tenho várias obras.

A Escola Politécnica é muito especial para todos nós. Qual o seu espaço preferido? Porquê?

Sem dúvida, o antigo Museu Mineralógico e Geológico. Foi a minha segunda casa. Fui lá aluno, professor e diretor. Sentir o local de trabalho como a própria casa foi o que me aconteceu. Foi uma entrega total para ser bem vivida com entusiasmo, com paixão! Ao longo da nossa vida estes sentimentos alcançam outras pessoas e repercutem-se no futuro. Trabalhar sem entrega e sem vontade deve ser um sofrimento.

O que representa para si um museu?

Um espaço aberto ao serviço do cidadão, que expõe testemunhos da criatividade humana, seja ela científica, artística ou outra, do seu ambiente e da sua história. Por exemplo, o Laboratório *Chimico* da Escola Politécnica é atualmente um lugar de sonho para estudar química.

Como aconteceu a direção do Museu Nacional de História Natural e da Ciência?

Por inerência de cargo. O professor mais antigo e disponível do Departamento de Geologia da Faculdade de

Ciências era o diretor do Museu e Laboratório Mineralógico e Geológico e, nesse ano de 1983, era eu. Com igual critério, o Professor Carlos Almaça era o diretor do Museu Zoológico e Antropológico (Museu Bocage) e o Professor Fernando Catarino era o diretor do Museu e Jardim Botânico. Quando, em 1993, estes três Museus se fundem no Museu Nacional de História Natural, os Professores Carlos Almaça, Fernando Catarino e eu acordámos que seria eu a exercer as funções de diretor do dito Museu.

Nas colaborações científicas e museológicas estabelecidas que países destaca?

França, Espanha, EUA e Inglaterra.

Qual o melhor museu de todo o mundo onde podemos estudar os recursos que temos neste planeta?

Dos que me foi dado conhecer, o *Natural History Museum* de Londres.

O vidro tem acompanhado a evolução da humanidade ao longo dos séculos, enriquecendo a qualidade de vida de milhões de pessoas. Conforto estético, térmico, acústico e de segurança. Desta forma, acabou por tornar-se um dos materiais mais importantes, versáteis e transformadores da história. Por essa razão, a Organização das Nações Unidas (ONU) aprovou a comemoração do Ano Internacional do Vidro em 2022, para que se conheçam as suas características que, combinadas com o engenho humano e a criatividade, pode ser aplicado em campos tão diversos como a arquitetura, a engenharia, a arte, a química e o laboratório entre outros. Como o vidro é 100% reciclável, será um material de futuro?

Sim, concordo plenamente. Só gasta muita energia no seu fabrico ou no seu reprocessamento. É importante conhecermos bem os vidros pois há centenas de formulações, aplicações diferenciadas. Aqui temos sempre de nos lembrar que a areia é a matéria-prima fundamental.

O que representa para si um livro?

É um companheiro. Quem não lê não tem companhia. Com um livro por perto nunca estamos sozinhos.

Qual o que lhe deu maior gozo escrever? E de qual o público gosta mais?

O que mais gostei de escrever foi "*As pedras e as palavras*". Para o público, "*Com Coentros e Conversas à Mistura*" é o mais atraente.



Os dinossáurios abriram-me a porta da comunicação social e de divulgação da Geologia.

E qual é o seu livro preferido?

"Dr. Arrowsmith", de Sinclair Lewis, e o "Memorial do Convento", de Saramago.

Qual a importância de escrever artigos de divulgação científica em português?

No que respeita a divulgação científica, a resposta é imediata: levar cultura científica a uma população a quem a escola deu diplomas, mas não deu cultura científica. Diga-se que o panorama é idêntico no que respeita às humanidades.

Ao longo dos anos trabalhou em várias áreas. Como retrospectiva, que trabalhos/publicações/atividades gostava ainda de destacar?

Empenhei-me para salvar as pegadas (de dinossáurios) e divulgar o Museu. Mas eu não sou paleontólogo. Só pretendia divulgar o museu e chamar lá as pessoas... Os dinossáurios abriram-me a porta da comunicação social e de divulgação da Geologia.

Os seus alunos têm um lugar especial no seu coração. O que pretende salientar?

Sim, os alunos ficam no meu coração, mas os bons alunos têm um lugar especial. Destaco o João Alvarinho Dias e o Nuno Pimentel, respetivamente o primeiro e o último dos meus doutores. Gosto de estar rodeado de gente nova. Gosto de Alegria e de ideias novas, de avanços e de descobertas.

O que destaca nas qualidades dos bons alunos?

Generosidade, frontalidade, lealdade, abertura de mentalidade, humildade, curiosidade e uma grande afetividade.

No entusiasmo que transmite, na arquitetura do seu discurso, na transmissão humilde do conhecimento, muito bem estruturada e que obriga o seu ouvinte a não mais esquecer, é inquieto no saber?

Sim, quero saber sempre mais. Não me canso com isto. Já me disseram que sou um "Geólogo todo-o-terreno". Vou a todo o lado! Dediquei-me a ensinar com desempenho pedagógico efetivo e afetivo. O que é fundamental é ensinar a "aprender a gostar de

saber"! Depois, cada miúdo utiliza a sua imaginação e criatividade. Ensinei como gostava que os meus professores me tivessem ensinado e guiei-me pelos que considereei serem as minhas referências. Acho que correu bastante bem.



Galopim de Carvalho com Carlos Marques da Silva, do Departamento de Geologia da FCUL, e Carla Simões do Agrupamento de Escolas de Caneças por ocasião da celebração do Primeiro Dia Internacional da Geodiversidade, organizada pelo Departamento de Geologia da FCUL a 6 de outubro de 2022.



Galopim de Carvalho no Festival Internacional de Ciência de Oeiras, outubro de 2022.

De uma forma científica afirmamos que os alimentos são fundamentais à vida, que nos fornecem energia, possuem funções reparadoras e de construção celular, além de protegerem e regularem o nosso corpo. A preparação dos alimentos conta histórias dos povos e de lugares. Comida também é cultura. Qual é a sua comida portuguesa favorita?

Não sei responder, tão boa é a gastronomia tradicional portuguesa.

Qual o melhor doce tradicional?

Encharcada.

O que representa para si a cor?

Beleza. Veja a minha coleção particular! É só beleza. Como a pedra azul do anel do Reitor do meu liceu em Évora...



Coleção particular de rochas e minerais de Galopim de Carvalho.



Coleção particular de rochas, minerais e fósseis de Galopim de Carvalho.



Condecoração de Galopim de Carvalho com as insígnias de Grande-Oficial da Ordem da Instrução Pública. Créditos: © Miguel Figueiredo Lopes/ Presidência da República, 31 de janeiro de 2023.

Qual a sua música portuguesa preferida? E a banda sonora?

"Eu vim de longe" do Zé Mário Branco. Banda sonora do filme "A missão", de Enio Morricone.

E qual o filme ou série preferidos?

O "Cinema Paraíso", de Giuseppe Tornatore, 1998.

Qual o melhor lugar do mundo?

Não sei responder.

A condecoração pelo Sr. Presidente da República tem um significado especial. Qual?

Na medida em que o Presidente da República representa Portugal, significa o reconhecimento do meu trabalho, pelo meu país.

Que mensagem gostaria de enviar a todos os químicos do mundo para tornar a Química uma Ciência amada e respeitada por todos?

Divulguem, por palavras simples e entendíveis, pelo cidadão comum, de que são feitas todas as coisas que nos rodeiam.

Professor e D. Isabel, foi um prazer estar convosco e partilhar todas estas memórias.

Bibliografia

A. M. G. Carvalho, "Fora de Portas. Memória e Reflexões", Âncora Editora, 2008 (dedicado aos seus netos com prefácio de José Barata Moura).

Artigos científicos a destacar por Galopim de Carvalho

A. M. G. Carvalho, "Malacostráceos das formações glauconiosas do Miocénico superior do litoral a norte do Cabo Espichel". *Boletim do Museu e Laboratório Mineralógico e Geológico da Faculdade de Ciências* **1959**, 8, 77-82.

A. M. G. Carvalho, "Contribuição para o conhecimento geológico da região de Ponte de Sor". *Comunicações dos Serviços Geológicos de Portugal* **1962**, 46, 331-347.

A. M. G. Carvalho, "Note sur les Bryozoaires du Miocène de Lisbonne". *Boletim da Sociedade Geológica de Portugal* **1964**, 15, 207-210.

A. M. G. Carvalho, M. L. Ubaldo, M. L. R. Quadrado, "Notas de mineralogia e petrografia portuguesas: Paligorsquite do complexo vulcânico de Lisboa". *Boletim do Museu e Laboratório Mineralógico e Geológico da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa* **1969-70**, 11, 233-239.

Citação:

[1] "Diário de Lisboa", n.º 16811, Ano 49, Quarta, 8 de outubro de 1969, p91, Fundação Mário Soares/DRR-Documents Ruella Ramos.

Nota final

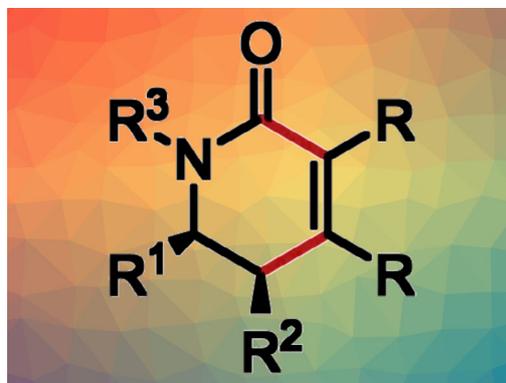
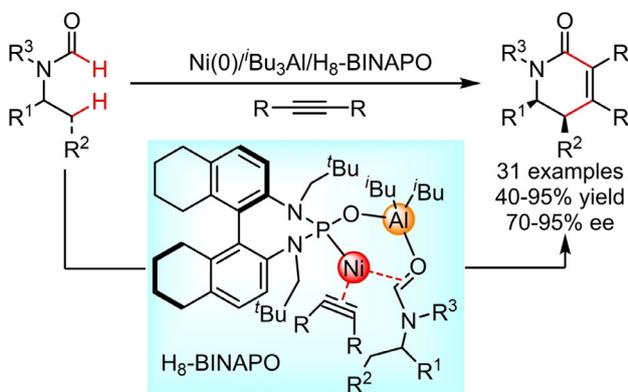
Um agradecimento muito especial ao meu colega Carlos Marques da Silva, paleontólogo, professor do Departamento de Geologia da CIÊNCIAS ULisboa, pela valiosa revisão do texto.

Ativação Enantiosseletiva de C-H em Formamidas Catalisada por Níquel

As reações de ativação C-H catalisadas por níquel têm sido muito estudadas. No entanto, a ativação enantiosseletiva de C(sp^3)-H com níquel, ou com outros metais de transição 3d, constitui um desafio devido à sensibilidade desses metais às estruturas, quer dos substratos quer dos ligandos, bem como à falta de ligandos quirais eficientes.

Mengchun Ye (Universidade Nankai, Tianjin, China) e colegas desenvolveram um novo tipo de ligando quiral baseado em óxido de fosfina para a ativação enantiosseletiva de C(sp^3)-H catalisada por níquel. A equipa de investigação usou uma naftidina parcialmente hidrogenada como estrutura quiral para preparar um óxido de fosfina, ao qual ligou níquel e alumínio, formando um catalisador bimetálico quiral eficiente (H_8 -BINAPO, imagem abaixo).

Usando esse catalisador, os investigadores realizaram a ciclização de formamidas com alcinos, tendo obtido uma série de heterociclos contendo nitrogénio que não são facilmente acessíveis por métodos tradicionais, com rendimentos entre 40-95% e com um excesso enantiomérico de 70-95%. O âmbito de



Crédito: ChemistryViews

aplicação desta reação inclui vários alcinos diarílicos e dialquílicos e ligações C(sp^3)-H primárias e secundárias.

Estudos mecanísticos sugerem o envolvimento de uma ativação C(sp^2)-H do formilo e uma etapa de ativação C(sp^3)-H de um grupo alquilo, sendo esta a etapa determinante da velocidade da reação. Segundo os investigadores, a atividade do catalisador bimetálico pode ser alargada a outras reações catalisadas por metais de transição 3d.

Fontes

Nickel-Catalyzed C-H Activation of Formamides, chemistryviews.org/nickel-catalyzed-c-h-activation-of-formamides (acedido em 06/02/2023).

Y. -X. Wang, F. -P. Zhang, H. Chen, Y. Li, J. -F. Li, M. Ye, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202209625. DOI: 10.1002/anie.202209625.

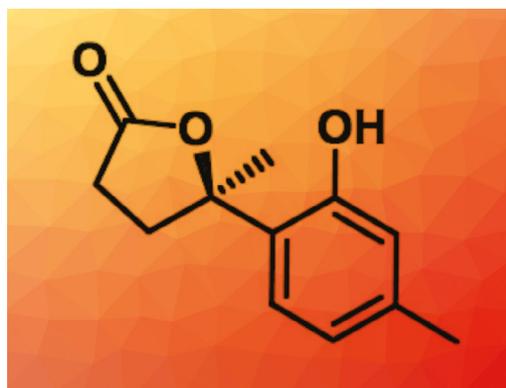
>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Síntese Total de 1-Hidroxiboivinianina A

A resistência bacteriana aos antibióticos é uma ameaça crescente à saúde humana, pelo que é urgente poder dispor de novas moléculas. A natureza tem sido uma inspiração constante na descoberta de novas pequenas moléculas com propriedades antimicrobianas. Explorações repetidas do meio ambiente, desde as fossas oceânicas profundas aos polos geográficos, permitiram aos cientistas isolar agentes antimicrobianos potentes e seletivos com estruturas químicas "intrigantes". Nas



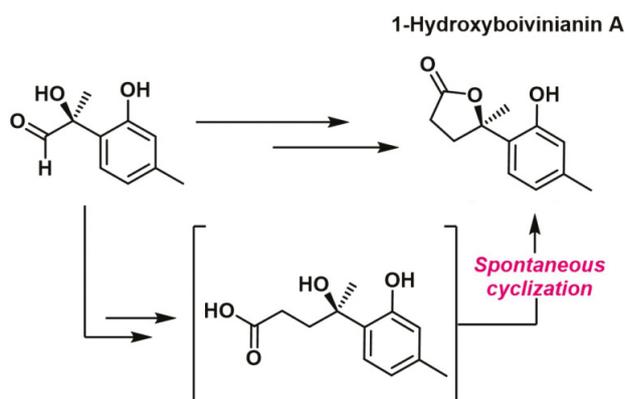
Crédito: ChemistryViews

últimas quatro décadas, mais de 60% dos antibióticos são baseados (ou derivados) em produtos naturais. Por exemplo, a 1-hidroxi-boivinianina A (na imagem), uma lactona contendo bisaboleno fenólico, isolada de sedimentos marinhos, evidenciou atividade antibacteriana contra o agente patogénico aquático *Vibrio harveyi*.

William Wuest e colegas (Emory University, Atlanta, EUA) sintetizaram a 1-hidroxi-boivinianina A e investigaram as suas atividades antibacteriana e antifúngica. A equipa de investigação iniciou a síntese com 2-bromo-5-metilfenol (disponível comercialmente), o qual após uma sequência de proteção benzílica, tratamento com *n*-BuLi e tetrametiletilenodiamina, seguida da adição diastereosseletiva de uma imidazolidinona quiral, originou um amina bicíclico como intermediário. Por hidrólise deste intermediário formou-se um álcool benzílico terciário. A lactona foi formada via reação intramolecular de Horner-Wadsworth-Emmons. Por fim, a remoção do grupo benzilo e a hidrogenação das duplas ligações originaram o produto pretendido.

Os investigadores completaram a síntese total de 1-hidroxi-boivinianina A e do seu enantiómero numa sequência reacional em seis passos e com um rendimento global de 42%. Obtido este produto natural, a equipa investigou as espécies ativas da lactona, verificando se esta era hidrolisada *in vitro*, tendo descoberto que podia ocorrer uma ciclização espontânea do ácido de cadeia linear (esquema), sugerindo, assim, a resistência da lactona à hidrólise.

Ambos os enantiómeros evidenciaram atividade



biológica insignificante contra uma pequena amostra de bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, mas demonstraram alguma atividade antifúngica contra fungos fitopatogénicos. Este trabalho pode fornecer informações úteis sobre a síntese de bisaboleno fenólicos contendo lactona e as suas atividades biológicas.

Fontes

Total Synthesis of 1-Hydroxyboivinianin A, chemistryviews.org/total-synthesis-of-1-hydroxyboivinianin-a/ (accedido em 21/10/2022).

I. K. Wilt, A. R. Demeritte, W. Wang, W. M. Wuest, *ChemMedChem*. **2022**, e202200363. DOI: 10.1002/cmdc.202200363.

>

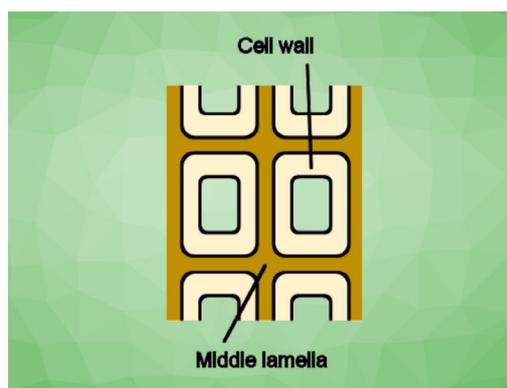
Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Oligómeros Derivados da Lignina Obtidos por Pirólise Controlada da Madeira

A lignina é um polímero aromático complexo e amorfo encontrado na madeira e noutras biomassas. Este polímero constitui cerca de 20-35% da biomassa lignocelulósica, sendo um possível recurso renovável para a produção de produtos químicos aromáticos de base biológica. Contudo, não existem processos eficientes para realizar esta conversão. A pirólise é uma abordagem promissora, mas apresenta como desvantagem a recondensação dos intermediários formados. As ligações éter presentes na lignina são clivadas de modo fácil a aproximadamente 350 °C, mas o rendimento dos produtos obtidos da despolimerização da lignina por pirólise é, geralmente, menor do que o esperado. Esta diferença pode ser explicada pela recondensação dos produtos de pirólise.

Haruo Kawamoto (Universidade de Quioto, Japão)



Crédito: ChemistryViews

e colegas descobriram que a utilização de difenoxi-benzeno como solvente aprótico, em conjunto com 1,2,3,10b-tetra-hidrofluoranteno como dador de hidrogénio, pode efetivamente suprimir a recondensação durante a pirólise da lignina, fornecendo oligómeros com rendimentos superiores a 80%. A equipa de investigação estudou a pirólise da madeira de cedro japonês (*Cryptomeria japonica*), uma madeira macia,

entre 270–380 °C. A extração com acetato de etilo e água foi usada para separar os oligómeros derivados da lignina dos produtos derivados de polissacáridos.

Os investigadores verificaram que a formação dos oligómeros depende da temperatura de pirólise, tendo sido cerca de 20% a 270 °C. Segundo este grupo de trabalho, uma explicação possível é que esses produtos derivados da lignina têm origem na lamela média que conecta as células da madeira (na imagem). O rendimento aumentou significativamente para cerca de 80% quando a celulose das paredes celulares da madeira foi degradada termicamente a uma temperatura superior a 300 °C.

Fontes

Lignin-Derived Oligomers Created by Controlled Pyrolysis of Wood, chemistryviews.org/lignin-derived-oligomers-created-by-controlled-pyrolysis-of-wood (acedido a 06/02/2023).

J. Q. Wang, E. Minami, H. Kawamoto, *ChemistryOpen* **2022**, *11*, e202200104. DOI: 10.1002/open.202200104.

>

Ana Paula Esteves

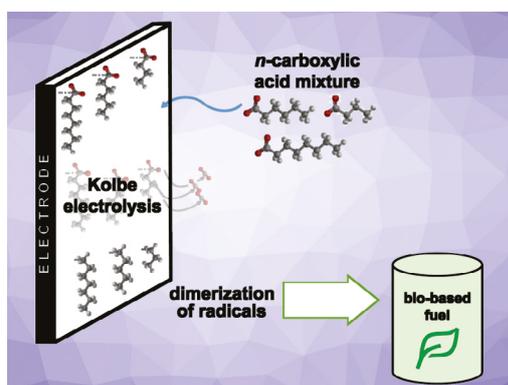
aesteves@quimica.uminho.pt

Eletrólise Eficiente de Misturas de Ácidos para Obtenção de Aditivos de Combustível

Numa economia mais “verde”, os recursos de base biológica podem constituir substitutos das matérias-primas fósseis para a síntese de produtos químicos e combustíveis. A eletroquímica é interessante neste contexto, em particular quando é usada eletricidade renovável. Por exemplo, a descarboxilação anódica de ácidos *n*-carboxílicos, também conhecida como eletrólise de Kolbe, pode ser útil em eletrobiorrefinarias.

A eletrólise de Kolbe (descoberta no século XIX) pode ser realizada à temperatura ambiente e em soluções aquosas, tornando-a ecológica. Este processo de eletrólise tem sido estudado e aplicado principalmente a ácidos *n*-carboxílicos de cadeia curta em baixas concentrações. Os ácidos de cadeia média (*Medium-Chain Carboxylic Acids*, MCCA), com um comprimento de cadeia entre quatro e oito átomos de carbono, podem resultar de resíduos e matérias-primas de base biológica através de conversões microbianas. Para uma implementação em eletrobiorrefinarias, a conversão de MCCA em concentrações mais elevadas é promissora, pois fornece misturas de hidrocarbonetos que podem ser usados como aditivos de combustível.

Falk Harnisch (Centro Helmholtz de Pesquisa Ambiental, Leipzig, Alemanha) e colegas descobriram que a eletrólise de uma mistura de MCCA em concentrações que se assemelham aos “caldos” obtidos por bioconversão evidencia um melhor desempenho em comparação com a eletrólise de ácidos únicos. A equipa de investigação realizou conversões eletroquímicas, por eletrólise de Kolbe, dos ácidos *n*-butanoico (C₄), *n*-hexanoico (C₆) e *n*-octanoico (C₈), bem como de uma mistura destes três ácidos. Os investigadores descobriram que a reação ocorre preferencialmente por dimerização, com seletividade até cerca de 70%. No entanto, para uma mistura de ácidos, este tipo de reação deve ser distinguido entre



Crédito: ChemistryViews

homo- e heteroacoplamento. Embora 66% do ácido hexanoico tenha originado dímeros por homoacoplamento, para os ácidos butanoico e octanoico ocorreu apenas 8–10% de formação de dímeros por homoacoplamento. Os ácidos butanoico e octanoico sofrem preferencialmente heteroacoplamento com os radicais derivados do ácido hexanoico. Assim, o heteroacoplamento aumentou significativamente a conversão global quando comparado com a eletrólise de ácidos únicos.

Fontes

Efficient Electrolysis of Acid Mixtures to Give Fuel Additives, chemistryviews.org/efficient-electrolysis-of-acid-mixtures-to-give-fuel-additives (acedido em 21/10/2022).

K. Neubert, M. Hell, M. C. Morejón, F. Harnisch, *ChemSusChem* **2022**, *15*, e202201426. DOI: 10.1002/cssc.202201426.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

MIP2Sensors: Uma Ferramenta “Light-up” para a Análise de Pesticidas em Azeite

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

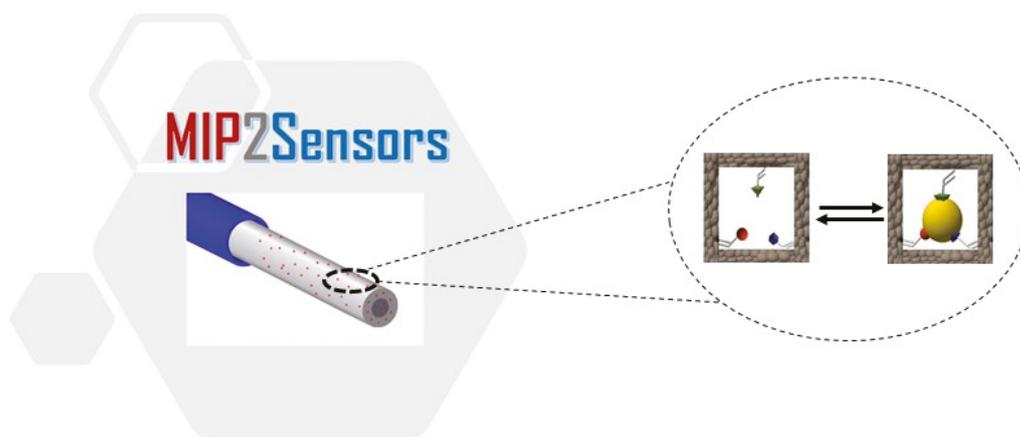
- • • No olival, os pesticidas são utilizados no combate de pragas e doenças de forma a minimizar perdas na produção de azeitona e consequentemente de azeite. De forma a garantir a segurança dos consumidores, as concentrações destes contaminantes são monitorizadas mediante a utilização de ferramentas analíticas, baseadas fundamentalmente em técnicas cromatográficas.

Recentemente, tem vindo a ser explorada a utilização de biossensores para a quantificação de resíduos de pesticidas em amostras alimentares, contudo ainda apresenta inúmeras limitações. Na tentativa de implementar uma abordagem alternativa, que permitisse ultrapassar as limitações associadas aos métodos existentes, surgiu a ideia de desenvolver o projeto *MIP2Sensors*. Este projeto visa o desenvolvimento de uma tecnologia de sensores, seletiva, fiável e robusta, para a análise vestigial de resíduos de pesticidas em azeite.

Nesse sentido, o projeto foca-se no desenvolvimento de sensores óticos baseados em polímeros molecularmente impressos fluorescentes (F-MIPs). Esta tecnologia alia algumas características peculiares, das quais se destacam: i) o uso da tecnologia de impressão molecular para a criação de recetores artificiais - denominados de polímeros molecularmente impressos (MIPs), os quais possuem locais de ligação seletivos capazes de reconhecer o pesticida alvo; ii) a incorporação de monómeros fluorescentes, como elemento de deteção ativo, na matriz polimérica dos MIPs, que permitirá a quantificação dos resíduos de pesticidas em azeite.

O projeto reúne uma equipa multidisciplinar com conhecimentos complementares, que permitirá o desenvolvimento de uma ferramenta de deteção “light-up” promissora no domínio da segurança alimentar, devido à elevada seletividade e estabilidade aliada à robustez, portabilidade e fácil manuseamento.

• • •



>

Ficha Técnica do Projeto

Raquel Garcia**Acrónimo:** *MIP2Sensors*.**Financiamento:** Fundação para a Ciência e a Tecnologia - PTDC/ASP-AGR/30097/2017.**Equipa:** **MED-UÉvora** – Raquel Garcia (IR), Maria João Cabrita (co-IR); **LAQV-REQUIMTE-UÉvora** – Elisabete Carreiro, João Paulo Ramalho; **NOVA.ID.FCT** – Rui Igreja, Marco Gomes da Silva, Hugo Águas, Pedro Barquinha, Rita Branquinho.

As Cientistas na Linha da Frente – Igualdade de Género

>
Raquel Gonçalves-Maia

Women Scientists on the Front Line - Gender Equality. *The Secretary-General of the United Nations stressed that it is essential to promote gender equality in the scientific and technological world where “women and girls belong to Science”. For centuries it was believed that men and women had different mental capacities. Women would be deprived of the intellectual equipment appropriate to the study of sciences. We discuss “mind” and “intelligence” of the human being. Kindra Crick illustrates our interpretation. Marie-Anne Paulze, Caroline Herschel and Marie Curie are “case studies”. The Nobel Prize, Abel Prize and Fields Medal are used to show gender inequality. What about women in Science in Portugal? We refer to the first female high school and the first schools of higher scientific education; and how its access rate positively contributed to women’s social status. Today, there are women at the head of departments and faculties, university deans and excellent researchers at the head of scientific research institutions. As examples, we will present Elvira Fortunato, Maria (Manuel) Mota, Paula Marques Alves, Ana Cannas da Silva, Mónica Bettencourt-Dias, Madalena Alves and Karina B. Xavier, scientists at the forefront.*

O Secretário-geral das Nações Unidas frisou que é essencial promover a igualdade de género no mundo científico e tecnológico, “as mulheres e as raparigas pertencem à Ciência”. Durante séculos acreditou-se que o homem e a mulher tinham diferentes capacidades mentais. As mulheres seriam desprovidas de equipamento intelectual apropriado ao estudo das ciências. Discutimos “mente” e “inteligência” do ser humano. Kindra Crick ilustra a nossa interpretação. Marie-Anne Paulze, Caroline Herschel e Marie Curie são “case studies”. Utilizaremos os Prémio Nobel, Prémio Abel e Medalha Fields para mostrar a desigualdade de género. E as mulheres na Ciência, em Portugal? Referimos o primeiro liceu feminino e as primeiras escolas de ensino científico superior; e como o seu ritmo de acesso trouxe um contributo muito positivo para o estatuto social da mulher. Hoje, há mulheres na direção de departamentos e de faculdades, reitoras nas universidades e excelentes investigadoras na chefia de instituições de investigação científica. A título de exemplo, apresentaremos Elvira Fortunato, Maria (Manuel) Mota, Paula Marques Alves, Ana Cannas da Silva, Mónica Bettencourt-Dias, Madalena Alves e Karina B. Xavier, cientistas na linha da frente.

1. A Equação da Igualdade

A Igualdade de Género na Ciência tem merecido por parte da ONU uma atenção especial. Em finais de 2015, a Assembleia Geral das Nações Unidas proclamou formalmente o dia 11 de fevereiro como sendo o Dia Internacional das Mulheres e Raparigas na Ciência. Todos os estados membros, organizações associadas e demais população foram convidados a apoiar atividades de sensibilização e educação públicas, “a fim de promover o acesso pleno e igualitário de mulheres e raparigas na educação, formação, emprego e processos

de tomada de decisão nas ciências”. Reconhecendo “a importante contribuição que a comunidade científica e tecnológica tem no desenvolvimento sustentável e na promoção do empoderamento, participação e contribuição de mulheres e raparigas na ciência, tecnologia e inovação”, reafirmou “que as mulheres têm um papel vital a desempenhar na consecução do desenvolvimento sustentável” e que é necessário garantir a sua “participação plena e efetiva nas políticas, programas e tomadas de decisões a todos os níveis” [1].

O Secretário-geral das Nações Unidas, António Guterres, frisou que é essencial promover a igualdade de género no mundo científico e tecnológico para construir um futuro melhor, tendo feito notar que 70% dos profissionais de saúde são mulheres, e que são as mulheres que mais carregam o peso do encerramento de escolas e do teletrabalho – têm mais responsabilidades... e, automaticamente, menos tempo para a investigação científica e tecnológica... Frisou, ainda, que a pandemia fez aumentar as desigualdades de género. E mais disse, que “as mulheres e as raparigas pertencem à Ciência”; que “é hora de reconhecer que mais diversidade promove mais inovação” [2].

Neste contexto, no passado dia 14 de fevereiro, teve lugar o *IUPAC Global Women's Breakfast*, em conjugação com a comemoração do *U. N. Day of Women and Girls in Science*, sob o lema “*Breaking Barriers in Science*” [3].

A Ciência e a Igualdade de Género devem avançar lado a lado, a fim de enfrentar os principais desafios mundiais. O que se pode traduzir pela “Equação da Igualdade”.

2. Capacidades mentais e inteligência humana

Durante muitos e muitos séculos, tanto os homens como as mulheres, em geral, acreditavam que existiam diferenças intrínsecas nas capacidades físicas, e também nas capacidades mentais do homem e da mulher.

Esta ideia tem sido tão persistente que, ainda hoje, é motivo de discussão. O debate ainda não terminou. Quando refiro “mente” aludo ao conceito utilizado para descrever as funções superiores do cérebro humano – pensamento, imaginação, memória, vontade, percepção, intenção... – que permitem o entendimento e a formulação de relações lógicas inerentes à razão.

A escultura denominada “*Cerebral Wilderness*”, que traduzimos por “Bravio Cerebral”, da autoria da artista plástica norte-americana Kindra Crick, cuja formação é de biologia molecular, ilustra o mecanismo multifatorial do cérebro, utilizando conceitos da neurociência moderna e enriquecendo-os com novas interpretações [4]. A criatividade é a essência da Arte, como também o é da Ciência. O avô paterno de Kindra Crick foi Francis Crick, um dos cientistas que desvendou a estrutura do ADN, e que dedicou uma boa parte da sua vida à investigação das atividades cerebrais (Figura 1).

Vivemos, europeus e cidadãos informados, entre aqueles habitantes da Terra que menor preconceito apresentam no domínio da igualdade de género no que respeita à inteligência humana. Quando refiro “inteligência” aludo à capacidade da mente para a compreensão, resolução de problemas, planeamento, inovação, comunicação... É a nossa “coroa de pensamento”, “*Crown of Thought*”, como Kindra Crick designou a sua monotíпия que mostra os neurónios altamente conectados que circundam o córtex e que se projetam para fora da área do cérebro “claustró”, envolvida na orquestração da nossa experiência consciente (Figura 2).

Figura 1 – “*Cerebral Wilderness*” e a autora Kindra Crick junto da sua obra “*What Mad Pursuit*”, evocação do ADN. (Cortesia de K. Crick)

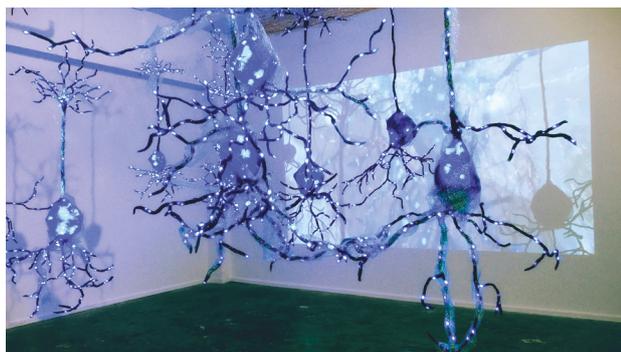


Figura 2 – “*Crown of Thought*”, por Kindra Crick. (Cortesia de K. Crick)

Sempre houve distinção entre “conhecimento” e “inteligência”, embora nenhum dos termos tenha uma interpretação universal. Os cientistas, porém, são praticamente unânimes em considerar que as funções cognitivas são processos inatos, embora os hábitos saudáveis as possam elevar. Certo é que a inteligência não se demonstra sem conhecimento.

Ao longo da história, o estudo das ciências, salvo raríssimas exceções, esteve interdito às mulheres, uma vez que se considerava que elas eram desprovidas do equipamento intelectual apropriado, eram frágeis, delicadas e pouco ou nada originais; por outras pa-

lavras, “não tinham cabeça”, não eram inteligentes. Acreditava-se que estudar e/ou produzir conhecimento científico era uma tarefa árdua, desgastante e inútil para as mulheres. E mais, pensava-se que se insistissem em estudar ciências punham em perigo a sua saúde e a dos filhos que viessem a gerar! A especulação chegou ao ponto de se pensar que havia um cromossoma responsável por tais características femininas.

Em contrapartida, admitia-se que as mulheres podiam ser boas assistentes, fazer algum trabalho rotineiro, monótono mas de grande precisão, como, por exemplo, tomar anotações, contar estrelas num observatório astronômico ou fazer análises médicas ou químicas por simples leitura num aparelho. Os homens de ciência apreciavam mesmo ter mulheres a ajudá-los, pois assim se libertavam do trabalho entediante. Curiosamente, algumas mulheres agradeciam tal deferência, a oportunidade que os cientistas lhes davam de praticarem um trabalho que era bem diferente do das tarefas caseiras. E, ao verem o que eles faziam, iam ganhando conhecimento e demonstrando os seus verdadeiros predicados.

Não admira que, de vez em quando, uma ou outra mulher se destacasse, saísse do estereótipo que lhe impunham. A interpretação do acontecido variava entre “está a colaborar com um homem de sucesso” ou “é uma grande exceção”, quando a primeira hipótese não se podia justificar.

3. Colaboradora, exceção ou regra? Três “casos de estudo”

Marie-Anne Pierrette Paulze (1758-1836) casou aos 13 anos com o grande químico francês Antoine Lavoisier, quinze anos mais velho. Muito aprendeu com ele na prática laboratorial e era mesmo ela quem, por vezes, tomava conta das aulas e dava instruções aos alunos. E muito aprendeu por conta própria! Marie-Anne foi muito mais do que uma simples assistente do marido. Estudou inglês para poder traduzir os trabalhos de química a fim de os divulgar na comunidade científica da Grã-Bretanha e dos EUA, e aprendeu desenho para ilustrar esses mesmos trabalhos (a fotografia era ainda inexistente). Raramente o seu nome aparecia nos artigos e livros publicados. Podemos vê-la na Figura 3, tomando anotações da experiência em curso sobre os gases inspirados e expirados, o oxigénio e o dióxido de carbono.

O casal foi retratado pelo famoso pintor Jacques-Louis David que, porventura, terá iniciado Marie-Anne nos estudos de desenho (Figura 4). Na tela, Lavoisier encontra-se sentado junto aos aparelhos que concebeu e utilizou e olha para a mulher. Esta, por sua vez, está de pé e olha para nós – talvez o inverso do que se esperaria...

Caroline Lucretia Herschel (1750-1848) é conside-

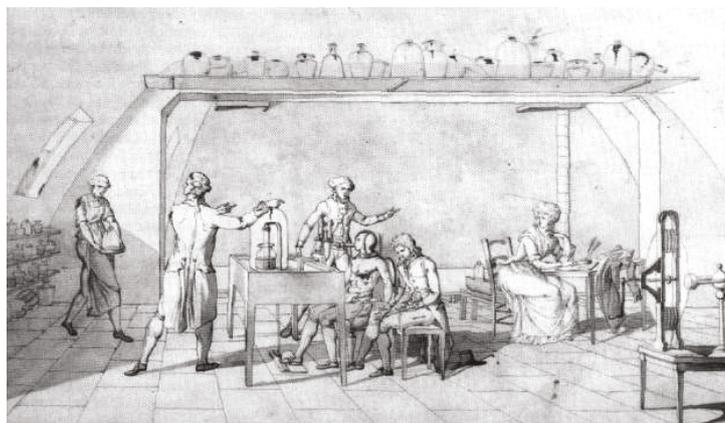


Figura 3 – Experiência no laboratório de Antoine Lavoisier.



Figura 4 – “Portrait de Monsieur Lavoisier et sa femme Marie-Anne Pierrette Paulze”, por Jacques-Louis David (1788), Metropolitan Museum of Art.

rada a primeira mulher astrónoma profissional, uma vez que era paga pelo estado a título de assistente do seu irmão. Nasceu em Hanôver (Alemanha) numa família de músicos e, juntamente com o irmão William, organista e professor de música, foi para Bath (Inglaterra), onde se tornou cantora de concertos de oratória. (Sir) William Herschel, porém, veio a interessar-se por Astronomia e tornou-se um astrónomo de renome. Caroline trabalhava com ele e para ele. Todavia, depois da morte do irmão, continuou a sua carreira de forma independente, fazendo as suas próprias observações, trabalhando e ordenando os dados astronômicos acumulados e fazendo descobertas espantosas de nebulosas e cometas. Teve o reconhecimento dos seus pares. Recebeu a Medalha de Ouro da *Astronomical Society of London*, sociedade que a tornou seu Membro Honorário (Figura 5).



Figura 5 – Caroline Herschel (1829) (autor: M. F. Tielemann) e William e Caroline Herschel fazendo observações astronômicas (*Astronomie populaire: description générale du ciels / Camille Flammarion, Paris, 1890*).



Figura 6 – Marie e Pierre Curie no laboratório (1900) (Autor: Vitold Muratov).

Neste contexto, não podemos esquecer a polaca Maria Salomea Skłodowska, Marie Curie, igualmente francesa por casamento com o físico Pierre Curie. Destacou-se, e muito, na Física e na Química. Marie e Pierre tinham projetos de investigação próprios mas, a certa altura, Pierre Curie optou mesmo por colaborar nos da mulher dado que os considerava ainda mais importantes do que os seus (Figura 6). É curiosa a semelhança de posição que o casal Curie apresenta neste retrato com a do casal Lavoisier na pintura de Louis David.

Marie Curie veio a receber o Prémio Nobel da Física conjuntamente com o marido (e Henri Becquerel) e, mais tarde, o Prémio Nobel da Química sozinha, pela descoberta da radioatividade e de novos elementos químicos naturalmente radioativos, o Rádio e o Polónio.

4. Os Prémios e a desigualdade de género

Em 1885, o químico sueco Alfred Nobel (1833-1896) estabeleceu, em testamento, os prémios que têm o seu nome (Figura 7). Nobel contemplou cinco áreas do conhecimento: Física, Química, Fisiologia ou Medicina, Literatura e Paz. Foram concedidos pela primeira vez em 1901 [5,6].

Os Prémios Nobel são prémios anuais e internacionais, cuja escolha última está a cargo das Academias Reais da Suécia e da Noruega: diploma, medalha e um robusto quantitativo monetário. São provavelmente os prémios mais desejados pelos cientistas das áreas designadas. Cada prémio pode ser atribuído a um máximo de três pessoas vivas.

Alfred Nobel “esqueceu” a Matemática... Contudo, o rei (da Suécia e Noruega) à época propôs a fundação de um prémio equivalente aos Nobel para a Matemática, com a designação de Prémio Abel, que começaria a ser atribuído em 1902, exatamente cem anos depois do nascimento do matemático. Niels Henrik Abel (1802-1829) foi um matemático norueguês que nos legou contribuições muito importantes sobre equações algébricas, integrais, funções elípticas e séries, entre outras (Figura 7). O seu nome está presente no Teorema de Abel-Ruffini e na Transformada de Abel. Tinha apenas 26 anos quando faleceu [7].

Porém, tendo o Reino da Suécia e Noruega enfrentado

graves problemas políticos, dividiu-se nos dois estados independentes em 1905 e a ideia do prémio foi esquecida. Em 2001 ressurgiu o interesse pela instituição do Prémio Abel, o qual foi atribuído pela primeira vez em 2003. É muito recente, mas já tem a sua história [8]. Entretanto, tinha sido criado um outro prémio para matemáticos com contribuições importantes, embora com características diferentes dos anteriores. Trata-se da Medalha Fields, cujo nome é uma homenagem ao matemático canadiano John Charles Fields (1863-1932), fundador do prémio (Figura 7). A medalha premeia jovens investigadores, com menos de 40 anos, e é atribuída de quatro em quatro anos; a primeira vez ocorreu em 1936 [9].

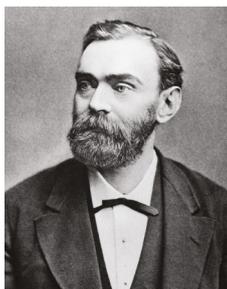


Figura 7 – Alfred Nobel, Niels Abel (autor: Johan Gorbitx) e John Fields.



Figura 8 – As cientistas do Prémio Nobel da Química no século XX. Marie Curie, Irène Joliot-Curie (autor: Harcourt) e Dorothy Hodgkin.



Figura 9 – As cientistas do Prémio Nobel da Química no século XXI. Ada Yonath (autor: Hareesh N. Nampoothiri), Frances Arnold (autor: Cmiche67), Jennifer Doudna (autor: Mrl611), Emmanuelle Charpentier (autor: Carries mum) e Carolyn Bertozzi (autor: Cmiche67).

Veremos, em seguida, no que concerne à igualdade/desigualdade de género, como tem sido a atribuição dos prémios anteriormente enumerados de âmbito científico [10]. Em 122 anos:

- (i) o Prémio Nobel da Física foi atribuído 116 vezes. Laureou 222 cientistas (221, visto que um recebeu-o duas vezes), dos quais quatro eram mulheres, isto é 1,8%;
- (ii) o Prémio Nobel da Química foi atribuído 114 vezes. Laureou 191 cientistas (189, visto que dois receberam-no duas vezes), dos quais oito eram mulheres, isto é 4,1%;
- (iii) o Prémio Nobel da Fisiologia ou Medicina foi atribuído 113 vezes. Laureou 225 cientistas, dos quais 12 eram mulheres, isto é 5,3%.

O Prémio Abel, por seu turno, foi outorgado a 25 cientistas, entre os quais uma mulher (4,0%). A Medalha Fields foi concedida a 64 matemáticos, entre os quais duas mulheres (3,1%). Ainda que as percentagens relativas a estes dois prémios sejam menos significativas, por a amostra ser menor, os resultados são em tudo semelhantes.

Analisemos, por imposição de gosto e interesse próprio, o caso da atribuição do Prémio Nobel da Química [11]. Durante os cem anos decorridos no século XX foram três as cientistas laureadas: Marie Curie (1911), Irène Joliot-Curie (1935) e Dorothy Hodgkin (1964) (Figura 8). Ao longo de pouco mais de duas décadas do século XXI, já são cinco as contempladas: Ada Yonath (2009), Frances Arnold (2018), Jennifer Doudna (2020), Emmanuelle Charpentier (2020) e Carolyn Bertozzi (2022) (Figura 9). Em 2020 aconteceu outro facto digno de realce: pela primeira vez o Prémio Nobel foi atribuído a duas mulheres simultaneamente.

5. E as Mulheres na Ciência em Portugal?

A taxa de analfabetismo em Portugal nos finais do século XIX era elevadíssima e as meninas que iam à escola aprendiam mais bordados do que aprendiam a ler e a contar. Só em novembro de 1906 foi criado em Portugal o primeiro liceu feminino, a atual Escola Secundária Maria Amália Vaz de Carvalho, em Lisboa.

A Academia Politécnica do Porto, fundada em 1836, e a Escola Politécnica de Lisboa, fundada em 1837, escolas de ensino superior, vieram a originar as Faculdades de Ciências das respetivas Universidades, em 1911 – após a implantação da República em Portugal.

Foi em 1880 que entrou a primeira mulher numa escola de ensino superior em Portugal, na Escola Politécnica de Lisboa. Tinha 25 anos, cursava Medicina e chamava-se Elisa Augusta da Conceição Andrade. As primeiras matrículas femininas na Academia Politécnica do Porto datam de 1885. Em 1891 entrou na Universidade de Coimbra a primeira jovem. Tinha 20 anos e cursou Matemática.

O ritmo do acesso feminino ao ensino nas escolas de ensino superior foi muito lento e só começou verdadeiramente a aumentar na segunda década do século XX. Em 1978, por exemplo, o doutoramento de uma mulher em ciências ainda era notícia a duas colunas, com direito a retrato, nos jornais nacionais! (Figura 10) (onde o termo “solvatação” sofreu a inapropriada metamorfose para “salvatoção”).

Hoje, são mais as raparigas do que os rapazes a frequentar a universidade em cursos científicos, na generalidade, mas não por especialidades. Certo é que esta evolução trouxe um contributo muito positivo para o estatuto social da mulher. No entanto, durante muito tempo, as boas qualificações no feminino não corresponderam a lugares de chefia. Eram maioritariamente os homens que os ocupavam. Em Portugal, nas últimas décadas, tem havido uma grande evolução neste sentido. Nas universidades, são já muitas as mulheres na direção dos departamentos e das faculdades. Há mulheres reitoras nas Universidades.

Há excelentes investigadoras, várias em postos de



Figura 10 – “Provas de doutoramento pela Faculdade de Ciências”, Diário de Notícias, 28 de novembro de 1978.

chefia nas grandes instituições de investigação científica. Refiro-me à Elvira, à Maria, à Paula, à Ana, à Mónica, à Madalena, à Karina e a muitas mais... Não as conhecem? A minha tarefa vai ser apresentá-las, a título de exemplo [12].



Figura 11 – Elvira Fortunato. (autor: 27 femmes racontées par Emilie Broussouloux – Présidence Française du Conseil de l'Union Européenne, Ministère de l'Europe et des Affaires Etrangères)

ELVIRA FORTUNATO – “Fazer investigação é tornar os sonhos realidades...”

ELVIRA FORTUNATO (n. 1964) é, muito provavelmente, a cientista portuguesa de maior prestígio e inovação (Figura 11). Licenciou-se e doutorou-se na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa (UNL). É cientista, investigadora e professora catedrática na UNL. É engenheira física, especialista na área da microeletrónica e da optoeletrónica. Liderou o Centro de Investigação de Materiais – CENIMAT, do Laboratório Associado i3N – *Institute for Nanostructures, Nanomodelling and Nanofabrication*.

Criou o primeiro transístor de papel e, mais recentemente, trabalhou na área da eletrónica transparente, onde é pioneira a nível mundial, com a criação de materiais que têm as propriedades do vidro, serem transparentes, por exemplo, mas também as propriedades dos metais, que são opacos e condutores. Tem mais de 800 publicações científicas. O seu reconhecimento internacional tem angariado milhões para a ciência.

Recebeu o Prémio Pessoa (2020), o prémio de Inovação em Materiais (2021), o Prémio dos Direitos Humanos, concedido pela Assembleia da República em 2021, e cerca de três dezenas de prémios internacionais, entre os quais se destaca a Medalha Czochochalski, atribuída pela Academia Polaca de Ciências, e a Medalha Blaise Pascal, conferida pela Academia Europeia de Ciências. É Doutora *Honoris Causa* pela Universidade de Galati (2009) e Grande Oficial da Ordem do Infante D. Henrique (2010). Integra, desde 2010, a Chancelaria das Ordens Honoríficas de Portugal e, desde 2016, o Conselho Científico da Comissão Europeia. Em 2018 foi eleita membro da Academia das Ciências de Lisboa. Em 2022 integrou o grupo de 27 mulheres inspiradoras da Europa, eleitas pela Presidência Francesa da União Europeia.

É uma séria candidata ao Prémio Nobel. É a nossa atual Ministra da Ciência, Tecnologia e Ensino Superior.



Figura 12 – Maria Mota. (Cortesia de M. Mota)

MARIA (MANUEL) MOTA – “O prazer da descoberta é algo inigualável”

MARIA (MANUEL) MOTA (n. 1971) leciona na Faculdade de Medicina da Universidade de Lisboa, é diretora executiva do Instituto de Medicina Molecular – iMM João Lobo Antunes e professora convidada na *New York University Medical School* (EUA) (Figura 12). É uma das maiores autoridades mundiais no estudo da malária.

É bióloga, licenciada pela Universidade do Porto, onde também obteve o grau de Mestre em Imunologia. Doutorou-se em Parasitologia Molecular pelo *University College London*, no Reino Unido.

Foi condecorada com a Ordem do Infante D. Henrique em 2005, agraciada com o Prémio Pessoa em 2013, e o Prémio Dona Antónia-Consagração da Carreira em 2019. Em 2016, foi eleita membro da Organização Europeia de Biologia Molecular (EMBO).

Recentemente passou a coordenar, dentro do iMM, um importante projeto de investigação clínica (iMM Care) em saúde e biomedicina, a ser desenvolvido nos próximos seis anos.



Figura 13 – Paula Marques Alves. (Cortesia de P. M. Alves; autor: Carla Pires)

PAULA MARQUES ALVES – “O que me apaixona no meu trabalho é o constante desafio...”

PAULA MARQUES ALVES (n. 1967) é professora na Universidade Nova de Lisboa e diretora executiva, a CEO, do Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica – iBET, instituição privada sem fins lucrativos, vanguarda

da investigação aplicada nas Ciências da Vida e em Biotecnologia (Figura 13). O iBET trabalha em estreita colaboração com as universidades e os institutos de investigação públicos e privados e com a indústria.

Licenciou-se em Bioquímica na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa e doutorou-se em Engenharia Bioquímica no Instituto de Tecnologia Química e Biológica – ITQB António Xavier da Universidade Nova de Lisboa (UNL). Desde 2007 que chefia e coordena a unidade de investigação Tecnologia de Célula Animal (*Animal Cell Technology Unit*), formada pelas entidades ITQB-UNL/iBET. A criação de produtos farmacêuticos complexos, vacinas e desenvolvimento de modelos celulares avançados para ensaios pré-clínicos, assim como o desenvolvimento de bioprocessos para produção de vírus para terapias génicas e de células para terapia celular, são objetivos fundamentais.

É a primeira, e única, mulher portuguesa eleita para a NAE – *National Academy of Engineering* (EUA), como seu membro internacional.



Figura 14 – Ana Cannas da Silva. (Cortesia de A. C. Silva; autor: George Bergman)

ANA CANNAS DA SILVA – “A beleza parece ser indissociável do ato de fazer matemática”

ANA CANNAS DA SILVA (n. 1968) é licenciada em Matemática pelo Instituto Superior Técnico – IST (UL), onde também já foi professora, e doutorada em Matemática pelo *Massachusetts Institute of Technology* – MIT nos EUA, especializada em geometria (Figura 14).

Lecionou na Universidade da Califórnia, em Berkeley, e na Universidade de Princeton, ambas nos EUA. Atualmente é professora e investigadora na Suíça, no ETH Zurich (Instituto Federal de Tecnologia de Zurique). Todas são instituições de ensino e investigação de enorme prestígio mundial.

Trabalhou sobre as simetrias na calçada portuguesa. O livro com o selo “Simetria Passo a Passo – Calçadas de Portugal” (*Step by Step Symmetry – Sidewalks of Portugal*), lançado pelos CTT, é da sua autoria. Tem vários livros publicados de Matemática superior e foi premiada pelas suas qualidades de excelência letiva.



Figura 15 – Mónica Bettencourt-Dias. (Cortesia de M. Bettencourt-Dias)

MÓNICA BETTENCOURT-DIAS – “Os meus dias são todos diferentes!”

MÓNICA BETTENCOURT-DIAS (n. 1974) é diretora do Instituto Gulbenkian de Ciência, cargo para o qual foi nomeada em 2018 pelo Conselho de Administração da Fundação Calouste Gulbenkian (Figura 15). Em 2022 foi eleita Presidente da EU-LIFE, aliança de centros de investigação de excelência em Ciências da Vida.

Licenciada em Bioquímica pela Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, foi no *University College London*, no Reino Unido, que se doutorou em Bioquímica e Biologia Molecular. Continuou a investigação na Universidade de Cambridge e, simultaneamente, obteve o diploma de Comunicação Científica do *Birkbeck College*. No seu laboratório no Instituto Gulbenkian, estuda-se a regulação do ciclo celular (Biomedicina), formação, evolução e desenvolvimento de tumores.

Recebeu o Prémio *Eppendorf Young European Investigator*, em 2007, e os Prémios *Pfizer* e *Keith Porter* (Sociedade Americana de Biologia Celular), ambos em 2012. Em 2022 foi homenageada com a Medalha de Mérito Municipal – ouro pela Câmara de Oeiras.



Figura 16 – Madalena Alves. (Cortesia de M. Alves)

MADALENA ALVES – “Seremos um conselho diretivo atento e interventivo...”

MADALENA ALVES (n. 1964) é presidente do Conselho Diretivo da FCT – a famosa Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Figura 16). Professora catedrática da Universidade do Minho (UM), licenciou-se em Engenharia Química na Universidade do Porto, recebeu

o grau de Mestre em Engenharia Bioquímica pelo Instituto Superior Técnico (UL) e doutorou-se em Engenharia Química e Biológica pela UM.

Foi diretora do Centro de Engenharia Biológica – CEB. Os seus interesses de investigação situam-se no domínio da Biotecnologia Ambiental. Tem vindo a coordenar e a colaborar em numerosos projetos nacionais e internacionais.

Em 2009 foi distinguida com um doutoramento *Honoris Causa* pela Universidade Técnica de Iasi (Roménia) e, em 2016, foi agraciada com o título honorífico de Cidadã de Mérito pela Câmara Municipal de Viana do Castelo, de onde é natural. Em 2022, o Município de Braga homenageou-a com a medalha de Grau Prata pelo seu mérito pessoal.



Figura 17 – Karina B. Xavier. (Cortesia de K. B. Xavier)

KARINA B. XAVIER – “Eu investigo a linguagem da química...”

KARINA B. XAVIER (n. 1971) é investigadora principal no Instituto Gulbenkian de Ciência, onde iniciou e dirige o Laboratório em Sinalização Bacteriana (Figura 17).

Obteve a licenciatura em Bioquímica na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa e doutorou-se pelo Instituto de Tecnologia Química e Biológica – ITQB António Xavier na área da fisiologia microbiana. A Genética Bacteriana e a Universidade de Princeton (EUA) seguiram-se ao seu doutoramento.

É especialista em “quorum sensing” (Microbiologia) – a capacidade das bactérias comunicarem entre si por intermediação a nível molecular, organizarem-se para funcionarem em grupo, para invadir o hospedeiro, para se adaptarem ao meio ambiente...

Recebeu o prémio “início de carreira” *Howards Hughes Medical Institute* em 2012. Foi eleita membro da *European Academy for Microbiology* (2019), da *EMBO-European Molecular Biology Organization* (2021) e da *American Academy for Microbiology* (2022).

6. Nem sempre foi assim, nem sempre é assim...

A análise profunda e exaustiva do protagonismo tardio das mulheres na Ciência e a valorização das muitas mulheres “assistentes” e “exceções” que foram preenchendo os séculos até aos dias de hoje pode ler-se na recente obra “Irmãs de Prometeu. A Química no Feminino” de João Paulo André [13].

No passado dia 8 de março, Dia Internacional das Mulheres, António Guterres afirmou que “o progresso dos direitos das mulheres está a desaparecer perante os nossos olhos”, que reverter esta tendência constitui uma das suas principais prioridades e “um pilar fundamental do trabalho das Nações Unidas em todo o mundo”, que é preciso “tomar medidas em várias frentes para garantir que as mulheres e as raparigas possam contribuir plenamente para o acervo mundial de conhecimento através da ciência e das tecnologias” [14].

Investigar, ensinar e divulgar é, provavelmente, a melhor trilogia que, todos nós, podemos oferecer em prol da Igualdade de Género.

>

Raquel Gonçalves-Maia

Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (Ciências U Lisboia).

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.

rmcgonc@gmail.com

ORCID.org/0000-0002-0543-8752

Referências

- [1] *United Nations – General Assembly, Resolution adopted by the General Assembly on 22 December 2015. 70/212. International Day of Women and Girls in Science*, documents-dds-ny.un.org/doc/UNDOC/GEN/N15/451/12/PDF/N1545112.pdf?OpenElement (acedido em 08/03/2023).
- [2] Nações Unidas – *ONU News*, Dia Internacional das Mulheres e Meninas na Ciência, youtube.com/watch?v=N5HitYvYf64 (acedido em 08/03/2023). youtube.com/watch?v=A11Dy9Z2V0o (acedido em 08/03/2023).
- [3] IUPAC – #GWB2023, *Breaking Barriers in Science, 14 February 2023-03-02* iupac.org/gwb (acedido em 08/03/2023).
- [4] Kindra Crick – *Biography*, kindracrick.com/bio.html (acedido em 08/03/2023).
- [5] *The Nobel Prize*, nobelprize.org (acedido em 08/03/2023).
- [6] *The Man Behind the Prize – Alfred Nobel*, nobelprize.org/alfred-nobel (acedido em 08/03/2023).
- [7] A. Stubhaug, “Henrik Abel and His Times. Called Too Soon by Flames Afar”, Tradução de R.H. Daly, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1.ª ed, 2000.
- [8] *The Abel Prize*, abelprize.no (acedido em 08/03/2023).
- [9] *International Mathematical Union – Fields Medal*, mathunion.org/imu-awards/fields-medal (acedido em 08/03/2023).
- [10] *All Nobel Prizes*, nobelprize.org/prizes/lists/all-nobel-prizes (acedido em 08/03/2023).
- [11] *Nobel Prize awarded women*, nobelprize.org/prizes/lists/nobel-prize-awarded-women (acedido em 08/03/2023).
- [12] “Mulheres na Ciência”, *Ciência Viva*, 1.ª ed. 2016; 2.ª ed. 2019; 3.ª ed. 2021, 4.ª ed. 2023, cienciaviva.pt/mulheresnaciencia (acedido em 08/03/2023).
- [13] J. P. André, “Irmãs de Prometeu. A Química no Feminino”, Gradiva, Lisboa, 2022.
- [14] A. Guterres, *Um apelo urgente à ação no Dia Internacional das Mulheres*, Público (Opinião), 8 de março de 2023 (acedido em 08/03/2023).

Catálise de Mn para a Formação Sustentável e Eficiente de Iminas: um Passo Rumo a uma Via Bimetálica *One-pot* para a Síntese de *N*-Heterociclos

>
Nuno Viduedo

An Efficient and Sustainable Mn-catalyzed Imine Formation: a Step Further to a One-pot Bimetallic Synthesis of *N*-heterocycles. *Imine derivatives have long been described as exceptionally useful compounds in organic chemistry, being mostly recognized as key intermediates in the synthesis of nitrogen heterocycles, such as indoles and azaindoles. In fact, these two similar *N*-heterocyclic scaffolds are widely present in biologically active compounds, thus considered privileged scaffolds in medicinal chemistry. Therefore, there is a great interest in developing new synthetic methodologies to obtain both imines and the corresponding heterocyclic structures efficiently. Recently, imine synthesis has been explored by oxidative coupling of aromatic amines and primary alcohols via metal-catalyzed processes. This work employed novel phosphine-free manganese(I) complexes to efficiently accomplish imine formation (up to 99% yield). Lastly, a bimetallic route, involving manganese and palladium catalysis, was established to achieve indoles and azaindoles from simple and commercially available aromatic amines and alcohols. This one-pot procedure, concerning three reaction steps, led to the indole scaffold with a promising total yield.*

*Há muito tempo que os compostos derivados de iminas são descritos como moléculas excepcionalmente úteis em química orgânica, sendo maioritariamente reconhecidos como intermediários fundamentais na síntese de heterociclos de nitrogénio, como indoles e azaindoles. De facto, estas estruturas *N*-heterocíclicas, semelhantes entre si, estão amplamente presentes em compostos biologicamente ativos, sendo por isso considerados estruturas privilegiadas em química medicinal. Desta forma, existe um grande interesse no desenvolvimento de novas metodologias para obter de forma eficiente tanto iminas como as respetivas estruturas heterocíclicas. Recentemente, a síntese de iminas tem sido explorada através do acoplamento oxidativo entre aminas aromáticas e álcoois primários por processos catalisados por metais. Neste trabalho, novos complexos de manganês(I), livres de fosfinas, foram utilizados para permitir a formação de iminas de forma eficiente (até 99% de rendimento). Por fim, foi estabelecida uma via bimetálica, envolvendo catálise de manganês e paládio, para a obtenção de indoles e azaindoles, a partir de materiais de partida simples e comercialmente disponíveis, como aminas aromáticas e álcoois. Este procedimento one-pot, envolvendo três passos reacionais, permitiu a obtenção da estrutura de indole com um rendimento global promissor.*

***N*-Heterociclos medicinalmente relevantes: os núcleos de indole e azaindole**

Os heterociclos de nitrogénio são estruturas amplamente presentes em compostos bioativos. Deste modo, o desenvolvimento de novas metodologias sustentáveis

que permitam o acesso fácil a estes núcleos tem-se tornado cada vez mais crucial [1].

O núcleo de indole, presente naturalmente no

nosso corpo em várias moléculas fundamentais e também com origem sintética (Figura 1), emerge como uma estrutura privilegiada em química biológica e medicinal devido ao enorme potencial em aplicações farmacológicas, apresentando atividade anticancerígena, antioxidante e anti-inflamatória [2].

Intimamente relacionado com o núcleo de indole, surge o núcleo de azaindole, presente em vários compostos bioativos (Figura 2). Este é um bioisómero da estrutura indólica, diferindo apenas na presença de um átomo de nitrogênio com a mesma hibridação sp^2 no anel de seis membros [3]. Estas moléculas apresentam propriedades fotoquímicas interessantes, sendo cromóforos fluorescentes eficientes, mas destacam-se principalmente em química medicinal devido à sua elevada afinidade para interagir com diversos alvos biológicos [4,5].

A indolização de Fischer, reportada pelo próprio no longínquo ano de 1883, foi a primeira estratégia sintética para a obtenção do núcleo indólico (Esquema 1a) e continua a ser uma das mais conhecidas e

utilizadas atualmente [6,7]. Este procedimento envolve a reação de condensação entre uma aril-hidrazina e uma cetona ou aldeído em meio ácido, formando um intermediário hidrazona, que posteriormente sofre uma ciclização intramolecular para originar o indole desejado. Contudo, esta síntese popular apresenta algumas desvantagens, nomeadamente a ausência de uma vasta gama de aril-hidrazinas disponíveis comercialmente e a utilização de condições reacionais severas [6]. O gigantesco avanço da química desde o século XIX até aos dias de hoje permitiu que novos protocolos de síntese, cada vez mais elegantes, fossem sendo desenvolvidos de maneira a obter o núcleo de indole de uma forma simples, eficiente e sustentável. Neste contexto, é de realçar o trabalho inovador de Yoshikai *et al.* em 2012, que reporta um procedimento numa só etapa (*one-pot*), envolvendo uma ativação da ligação C-H catalisada por paládio, utilizando iminas como intermediários-chave para a obtenção de indoles (Esquema 1b) [8].

Figura 1 - A presença do núcleo de indole (indicado a cor vermelha) em moléculas de origem natural e sintética.

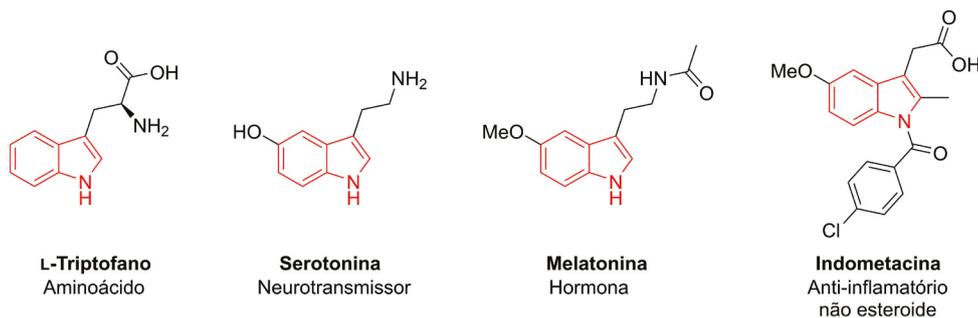
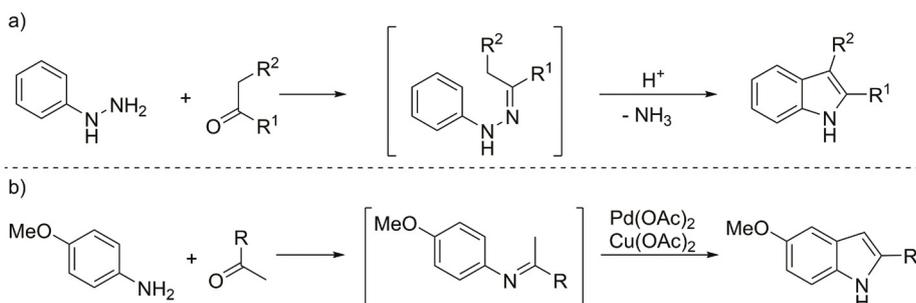
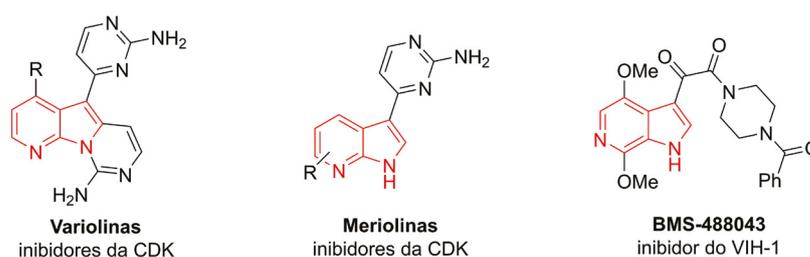


Figura 2 - A presença do núcleo de azaindole (indicado a cor vermelha) em compostos bioativos. CDK - *cyclin-dependent kinase*; VIH-1 - vírus da imunodeficiência humana do tipo 1.



Esquema 1 - Métodos para a síntese de indoles. a) Indolização de Fischer; b) Via catalítica desenvolvida por Yoshikai *et al.* [8].

Relativamente à estrutura azaindólica, sinteticamente mais desafiante, Marques *et al.* reporta em 2016 uma reação em cascata envolvendo um acoplamento cruzado C-N, seguida de uma reação de Heck (Esquema 2) [9]. Quatro anos mais tarde, foi desenvolvida uma estratégia *one-pot*, desta vez evitando a utilização de aminopiridinas halogenadas, onde o passo final envolve uma funcionalização da ligação C-H [10]. Tal como na metodologia de Yoshikai, as iminas desempenham também aqui um papel fundamental, sendo os intermediários-chave que sofrem a ciclização intramolecular para a formação da estrutura *N*-heterocíclica desejada.

Apesar de promissoras, estas últimas abordagens envolvem a utilização de brometos de vinilo, que para além de exigirem condições sintéticas severas, apresentam baixa disponibilidade comercial e alguma toxicidade. Desta forma, a substituição destes substratos halogenados por reagentes de partida mais simples, mas que mantivessem uma reatividade química semelhante, poderia permitir o desenvolvimento de um novo método mais sustentável e apelativo para a síntese de iminas e, conseqüentemente, heterociclos de nitrogénio.

Iminas, intermediários-chave em química orgânica

Uma imina é um grupo funcional ou composto que contém uma ligação dupla carbono-nitrogénio, possuindo a estrutura $RN=CR_2$ ($R = H$, hidrocarbíl). Este grupo funcional encontra-se presente numa enorme variedade de produtos naturais e sintéticos, que apresentam geralmente atividades biológicas interessantes (Figura 3), com destaque para as suas propriedades antifúngicas, antibacterianas, antiproliferativas, anti-inflamatórias, antivirais e antipiréticas [11,12]. Para além do seu potencial na área medicinal, estas estruturas versáteis são ainda amplamente utilizadas como pigmentos, estabilizadores de polímeros e ligandos em química de coordenação, providenciando complexos metálicos interessantes para catálise [12,13]. Por outro lado, as iminas e os seus derivados são há muito reconhecidos como intermediários sintéticos de extrema relevância, particularmente na construção de heterociclos nitrogenados, sendo, portanto, muito relevante o desenvolvimento de novos métodos de síntese [14].

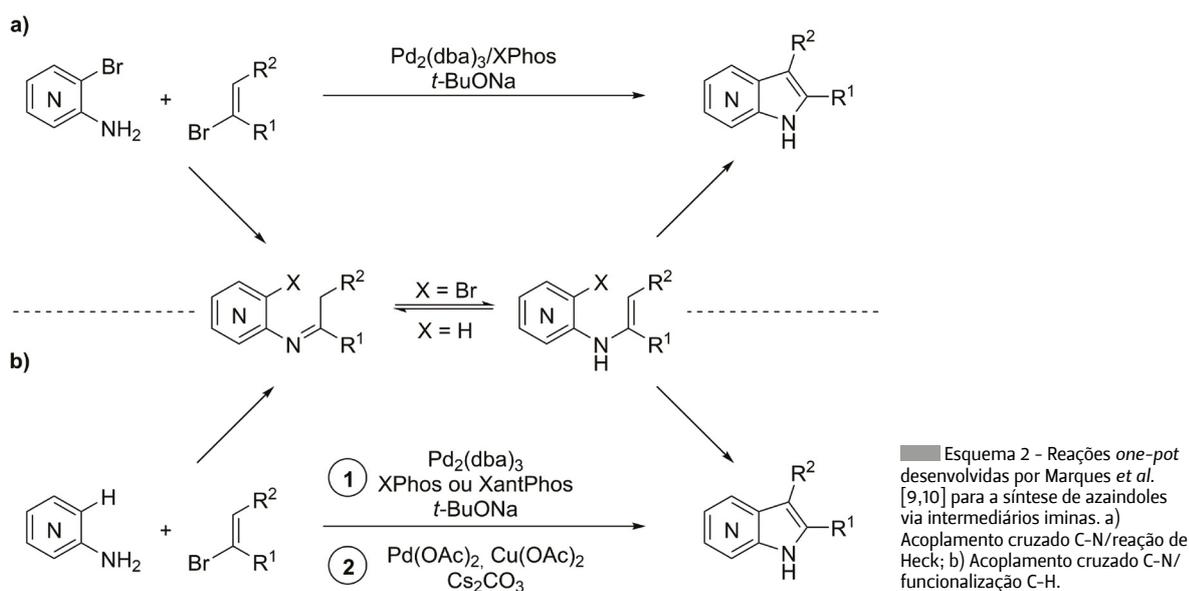
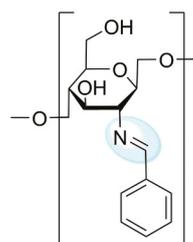
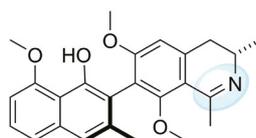


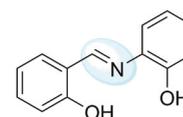
Figura 3 - A presença do grupo funcional imina (indicado a cor azul) em compostos bioativos.



Base de Schiff derivada do quitosano
atividade antifúngica



Ancistrocladina
atividade antimalária



N-(Salicilideno)-2-hidroxi-anilina
atividade antibacteriana

Historicamente, a primeira síntese de uma imina foi reportada em 1864 por Hugo Schiff, e envolvia a condensação de um aldeído ou cetona com uma amina, sob destilação azeotrópica para remover a água liberada [15]. Contudo, este método clássico estava muito dependente da utilização de compostos carbonílicos muito eletrofílicos e amins fortemente nucleofílicas [16]. Ao longo dos anos, várias adaptações foram sendo realizadas, introduzindo-se ácidos de Lewis para facilitar a reação ou trocando as montagens complexas de destilação por procedimentos mais simples, nomeadamente de adsorção, envolvendo agentes exsiccantes, como peneiros moleculares [17-19]. Mesmo assim, a maioria destas metodologias continuava a apresentar limitações, sendo razoavelmente eficientes apenas para substratos específicos, apresentando tempos de reação longos e/ou requerendo condições vigorosas [20-22].

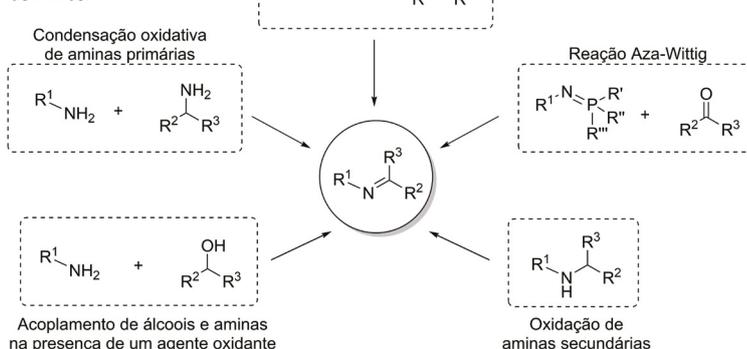
Neste contexto, metodologias sintéticas alternativas foram sendo desenvolvidas, envolvendo a reação aza-Wittig [23] ou métodos oxidativos, como a oxidação de amins secundárias [24], a condensação oxidativa de amins primárias [25] ou o acoplamento de álcoois e amins na presença de um oxidante [26] (Esquema 3). No entanto, o uso de reagentes tóxicos e a obtenção de uma baixa economia atômica, bem como uma baixa seletividade são frequentemente observados nestes protocolos [19,21,27].

Por todos os motivos apresentados, torna-se claro que novas estratégias sintéticas para a obtenção eficiente e sustentável de iminas são altamente desejadas. Nos últimos anos, tem havido um desenvolvimento crescente de complexos metálicos que permitem a obtenção de iminas, a partir de álcoois e amins, de forma catalítica (Esquema 4) [28]. A maioria destes catalisadores

começa por realizar a desidrogenação de um álcool, originando o composto carbonílico correspondente (aldeído ou cetona), auxiliando ainda na reação de condensação e respetiva formação da imina [29].

O início desta investigação remonta ao ano de 2010, quando Milstein e colaboradores descobriram a capacidade de um dos seus complexos de ruténio para realizar esta transformação [30]. Nos anos que se sucederam a esta descoberta, várias equipas de investigação identificaram novos catalisadores contendo metais preciosos (Ru, Ir, Os) capazes de tornar este processo o mais eficiente e versátil possível [31-35]. A partir de 2013, e ao longo dessa década, a utilização de metais abundantes (Co, Fe, Mn) tornou-se cada vez mais comum nesta área, uma vez que traziam vantagens consideráveis, nomeadamente ao nível da sustentabilidade e do custo do processo [36-38]. Contudo, durante muito tempo, a presença de fosfinas nos complexos metálicos foi praticamente incontornável. Apesar destas apresentarem um conjunto alargado de aplicações em catálise homogénea, possuem também algumas limitações, como a sua sensibilidade ao ar e à humidade, o custo relativamente elevado e procedimentos sintéticos complexos [13,39]. Em 2019, reportado por Srimani, surgiu o primeiro complexo de manganês sem fosfinas, capaz de promover a formação eficiente de iminas a partir de álcoois benzílicos e amins [39]. Um ano depois, Chai e colaboradores, desenvolveram um novo complexo de manganês, também sem fosfinas, capaz de efetuar a transformação sob condições ligeiramente mais suaves e usando uma menor quantidade de catalisador [13]. A Figura 4 mostra alguns exemplos de complexos metálicos usados na síntese de iminas a partir de álcoois e amins.

Esquema 3 - Diferentes metodologias sintéticas para a formação de iminas.



O primeiro passo: uma síntese eficiente de iminas a partir de álcoois e amins, catalisada por complexos de manganês

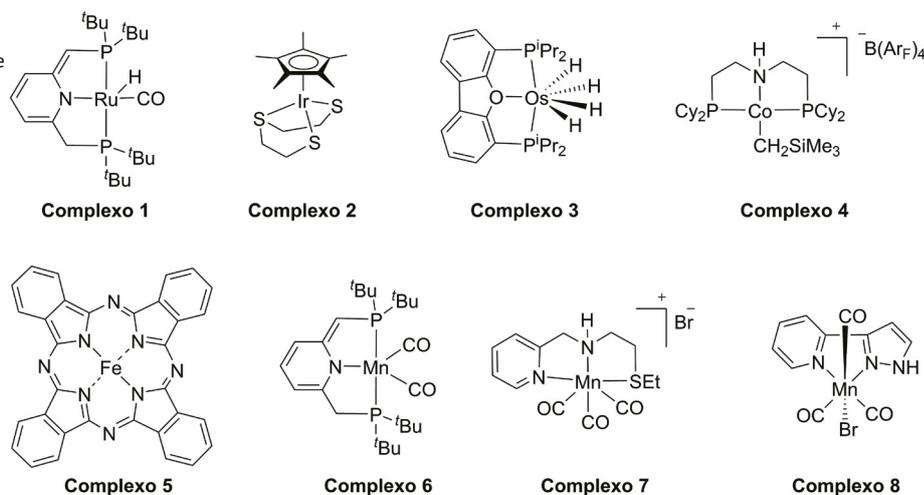
Esta investigação usando complexos de manganês [13,39] serviu de inspiração a Marques e Royo, que iniciaram o desenvolvimento de novos catalisadores de manganês sem fosfinas. Tendo como ensaio modelo a reação da anilina com o álcool benzílico, na presença de uma quantidade catalítica de *tert*-butóxido de potássio e peneiros moleculares, foram testados seis complexos de modo a avaliar a sua atividade (Figura 5).

Destes seis catalisadores, os dois que apresentavam ligandos di-triazole (Mn-4 e Mn-6) destacaram-se com conversões superiores a 95%. A versatilidade do procedimento foi estudada através da reação de diferentes álcoois benzílicos primários com várias

Esquema 4 - Catalise metálica para a síntese de iminas a partir de álcoois e amins.



Figura 4 - Complexos metálicos utilizados na síntese de iminas a partir de álcoois e aminas.



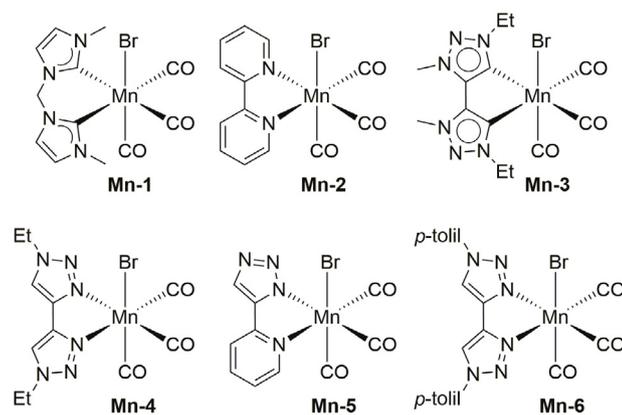
aminas aromáticas e heteroaromáticas, tendo-se obtido 25 iminas, com rendimentos muito bons a excelentes quase na totalidade dos casos. A principal dificuldade foi conseguir tornar a metodologia eficiente aquando da utilização de álcoois secundários. Nesse caso, foi necessário o uso de um agente oxidante externo, o hidroperóxido de *tert*-butilo (TBHP), para em conjunto com o catalisador de manganês, efetuar a oxidação do álcool de uma forma mais efetiva.

Desenvolvimento de uma estratégia sintética bimetalica *one-pot* para a síntese de *N*-heterociclos

Após o desenvolvimento de um procedimento eficiente e sustentável para a obtenção de iminas, restava agora seguir até ao objetivo final: transformá-las em indoles (ou azaindoles), utilizando a bem-estabelecida catálise de paládio, tornando ambos os passos compatíveis, e criando assim uma via bimetalica *one-pot* para a obtenção destes importantes compostos *N*-heterocíclicos.

Como referido acima, a utilização de álcoois secundários, imprescindíveis para a formação da imina necessária para que ocorra ciclização, apresenta dificuldades acrescidas no seu processo de conversão a cetona. Este desafio foi ultrapassado com a utilização do TBHP e através da realização do procedimento de forma sequencial (Esquema 5): primeiramente, a oxidação do álcool secundário na presença do complexo de manganês e do agente oxidante (que permite atingir um rendimento de 91% na oxidação do 1-feniletanol a acetofenona), adicionando-se de seguida a amina aromática e os peneiros moleculares que levam à formação da imina correspondente; por fim, o passo de ciclização que envolveria a catálise de paládio e a formação de uma nova ligação C-C através de uma ativação da ligação C-H no intermediário imina. É importante relevar que todos os passos foram realizados num modo *one-pot*, sem que houvesse isolamento de qualquer um dos intermediários.

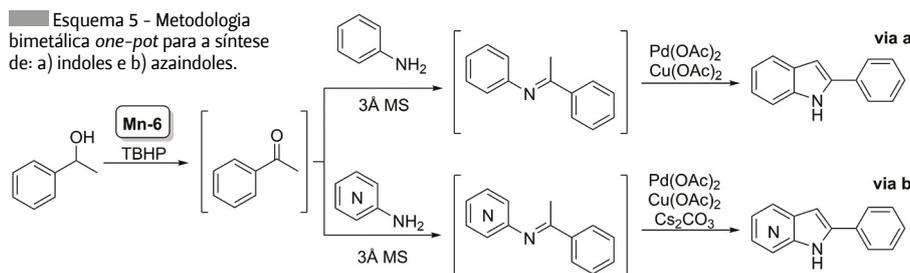
Figura 5 - Catalisadores de manganês(I) testados para a síntese de iminas.



Deste modo, o 2-fenilindole, resultante da reação envolvendo a anilina e o 1-feniletanol, foi obtido com um rendimento total bastante promissor (30%). O procedimento foi também testado com vista à obtenção de alguns derivados azaindólicos, embora com menor sucesso, tendo apenas sido observada a sua formação através de cromatografia em camada fina. Contudo, várias ilações importantes foram retiradas acerca da reatividade destes compostos e de subprodutos que possam estar a ser formados na reação, nomeadamente envolvendo a oxidação da aminopiridina utilizada como material de partida.

Em conclusão, foram apresentadas diversas metodologias para a síntese de iminas e seus derivados *N*-heterocíclicos [40,41], em particular indoles e azaindoles, tendo sido destacada a importância do desenvolvimento de novos métodos de síntese mais sustentáveis. Neste contexto, destacaram-se os estudos recentes envolvendo uma metodologia sintética bimetalica *one-pot*, usando catalisadores de manganês sem recurso a fosfinas.

Esquema 5 - Metodologia bimetalítica one-pot para a síntese de: a) indoles e b) azaindoles.



Agradecimentos

O autor agradece à SPQ pelo privilégio de receber o prémio de melhor tese de mestrado em Química Orgânica (2021), em Portugal, assim como o convite para a divulgação do trabalho de mestrado no QUÍMICA. Gostaria, por fim, de agradecer às minhas

orientadoras, Professora Maria Manuel Marques e Professora Beatriz Royo, por todo o apoio, e à Fundação para a Ciência e a Tecnologia pelo financiamento do projeto no âmbito do qual o trabalho foi desenvolvido (PTDC/QUI-QOR/0712/2020).

Referências

- [1] B. Zhang, A. Studer, *Chem. Soc. Rev.* **2015**, 44, 3505-3521. DOI: 10.1039/c5cs00083a.
- [2] M. S. Estevão, L. C. Carvalho, D. Ribeiro, D. Couto, M. Freitas, A. Gomes, L. M. Ferreira, E. Fernandes, M. M. B. Marques, *Eur. J. Med. Chem.* **2010**, 45, 4869-4878. DOI: 10.1016/j.ejmech.2010.07.059.
- [3] J. J. Song, J. T. Reeves, F. Gallou, Z. Tan, N. K. Yee, C. H. Senanayake, *Chem. Soc. Rev.* **2007**, 36, 1120-1132. DOI: 10.1039/b607868k.
- [4] M. C. de Mattos, S. Alatorre-Santamaría, V. Gotor-Fernández, V. Gotor, *Synthesis (Stuttg.)*. **2007**, 2149-2152. DOI: 10.1055/s-2007-983730.
- [5] M. Nazaré, C. Schneider, A. Lindenschmidt, D. W. Will, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2004**, 43, 4526-4528. DOI: 10.1002/anie.200460122.
- [6] J. Li, J. M. Cook, "Name Reactions in Heterocyclic Chemistry", John Wiley & Sons, Inc., Hoboken (New Jersey, EUA), **2005**.
- [7] E. Fischer, F. Jourdan, *Berichte der Dtsch. Chem. Gesellschaft.* **1883**, 16, 2241-2245. DOI: 10.1002/ber.188301602141.
- [8] Y. Wei, I. Deb, N. Yoshikai, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 9098-9101. DOI: 10.1021/ja3030824.
- [9] M. J. D. Pires, D. L. Poeira, S. I. Purificação, M. M. B. Marques, *Org. Lett.* **2016**, 18, 3250-3253. DOI: 10.1021/acs.orglett.6b01500.
- [10] A. S. Santos, M. M. Martins, A. C. Mortinho, A. M. S. Silva, M. M. B. Marques, *Tetrahedron Lett.* **2020**, 61, 152303. DOI: 10.1016/j.tetlet.2020.152303.
- [11] F. N. Ejah, T. M. Fasina, O. B. Familoni, F. T. Ogunsola, *Adv. Biol. Chem.* **2013**, 3, 475-479. DOI: 10.4236/abc.2013.35051.
- [12] C. M. da Silva, D. L. da Silva, L. V. Modolo, R. B. Alves, M. A. de Resende, C. V. B. Martins, Á. de Fátima, *J. Adv. Res.* **2011**, 2, 1-8. DOI: 10.1016/j.jare.2010.05.004.
- [13] H. Chai, K. Yu, B. Liu, W. Tan, G. Zhang, *Organometallics* **2020**, 39, 217-226. DOI: 10.1021/acs.organomet.9b00769.
- [14] S. F. Martin, *Pure Appl. Chem.* **2009**, 81, 195-204. DOI: 10.1351/PAC-CO-08-07-03.
- [15] H. Schiff, *Justus Liebigs Ann. Chem.* **1864**, 131, 118-119. DOI: 10.1002/jlac.18641310113.
- [16] A. K. Chakraborti, S. Bhagat, S. Rudrawar, *Tetrahedron Lett.* **2004**, 45, 7641-7644. DOI: 10.1016/j.tetlet.2004.08.097.
- [17] G. C. Look, M. M. Murphy, D. A. Campbell, M. A. Gallop, *Tetrahedron Lett.* **1995**, 36, 2937-2940. DOI: 10.1016/0040-4039(95)00442-F.
- [18] B. E. Love, J. Ren, *J. Org. Chem.* **1993**, 58, 5556-5557. DOI: 10.1021/jo00072a051.
- [19] F. H. Westheimer, K. Taguchi, *J. Org. Chem.* **1971**, 36, 1570-1572. DOI: 10.1021/jo00810a033.
- [20] R. W. Layer, *Chem. Rev.* **1963**, 63, 489-510. DOI: 10.1021/cr60225a003.
- [21] V. Tamilthendral, R. Ramesh, J. G. Malecki, *Appl. Organomet. Chem.* **2021**, 35, 1-12. DOI: 10.1002/aoc.6122.
- [22] R. D. Patil, S. Adimurthy, *Asian J. Org. Chem.* **2013**, 2, 726-744. DOI: 10.1002/ajoc.201300012.
- [23] F. Palacios, C. Alonso, D. Aparicio, G. Rubiales, J. M. de los Santos, *Tetrahedron* **2007**, 63, 523-575. DOI: 10.1016/j.tet.2006.09.048.
- [24] G. Jiang, J. Chen, J. S. Huang, C. M. Che, *Org. Lett.* **2009**, 11, 4568-4571. DOI: 10.1021/ol9018166.
- [25] L. Liu, S. Zhang, X. Fu, C.-H. Yan, *Chem. Commun.* **2011**, 47, 10148-10150. DOI: 10.1039/c1cc13202d.
- [26] L. Jiang, L. Jin, H. Tian, X. Yuan, X. Yu, Q. Xu, *Chem. Commun.* **2011**, 47, 10833-10835. DOI: 10.1039/c1cc14242a.
- [27] J. T. Reeves, M. D. Visco, M. A. Marsini, N. Grinberg, C. A. Busacca, A. E. Mattson, C. H. Senanayake, *Org. Lett.* **2015**, 17, 2442-2445. DOI: 10.1021/acs.orglett.5b00949.
- [28] B. Maji, M. K. Barman, *Synthesis* **2017**, 49, 3377-3393. DOI: 10.1055/s-0036-1590818.
- [29] P. Nad, A. Mukherjee, *Asian J. Org. Chem.* **2021**, 10, 1958-1985. DOI: 10.1002/ajoc.202100249.
- [30] B. Gnanaprakasam, J. Zhang, D. Milstein, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, 49, 1468-1471. DOI: 10.1002/anie.200907018.
- [31] A. Maggi, R. Madsen, *Organometallics* **2012**, 31, 451-455. DOI: 10.1021/om201095m.
- [32] Y. Nakajima, Y. Okamoto, Y. H. Chang, F. Ozawa, *Organometallics* **2013**, 32, 2918-2925. DOI: 10.1021/om400126v.
- [33] S. Musa, S. Fronton, L. Vaccaro, D. Gelman, *Organometallics* **2013**, 32, 3069-3073. DOI: 10.1021/om400285r.
- [34] C. Xu, L. Y. Goh, S. A. Pullarkat, *Organometallics* **2011**, 30, 6499-6502. DOI: 10.1021/om200883e.
- [35] M. A. Esteruelas, N. Honczek, M. Oliván, E. Oñate, M. Valencia, *Organometallics* **2011**, 30, 2468-2471. DOI: 10.1021/om200290u.
- [36] G. Zhang, S. K. Hanson, *Org. Lett.* **2013**, 15, 650-653. DOI: 10.1021/ol303479f.
- [37] M. Bala, P. K. Verma, N. Kumar, U. Sharma, B. Singh, *Can. J. Chem.* **2013**, 91, 732-737. DOI: 10.1139/cjc-2012-0399.
- [38] A. Mukherjee, A. Nerush, G. Leitius, L. J. W. Shimon, Y. Ben David, N. A. Espinosa Jalapa, D. Milstein, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 4298-4301. DOI: 10.1021/jacs.5b13519.
- [39] K. Das, A. Mondal, D. Pal, H. K. Srivastava, D. Srimani, *Organometallics* **2019**, 38, 1815-1825. DOI: 10.1021/acs.organomet.9b00131.
- [40] D. Raydan, S. Friães, N. Viduedo, A. S. Santos, C. S. B. Gomes, B. Royo, M. M. B. Marques, *Synlett* **2022**, 33, 1290-1294. DOI: 10.1055/a-1828-1678.
- [41] R. Ferro, N. Viduedo, A. S. Santos, B. Royo, A. M. S. Silva, M. M. B. Marques, *Synthesis* **2023**. DOI: 10.1055/a-2035-6420.

>

Nuno Viduedo

NOVA School of Science and Technology (FCT-NOVA).

Nasceu em 1998, em Lisboa, Portugal.

Obteve a sua licenciatura em Química

Aplicada, em 2019, na NOVA School of

Science and Technology (FCT-NOVA).

Obteve o mestrado em Química Bioor-

gânica da mesma instituição, em 2021.

No ano seguinte, foi distinguido pela

SPQ com o prémio para melhor tese de

mestrado em Química Orgânica (2021), em Portugal. Atualmente, encontra-se a

iniciar o seu doutoramento em Química

Sustentável na FCT-NOVA. A sua investi-

gação centra-se no desenvolvimento de

novas abordagens sintéticas, envolvendo

catálise metálica, para a construção de

heterociclos de nitrogénio.

n.viduedo@campus.fct.unl.pt

ORCID.org/0000-0002-5234-1427

Da Somatostatina à Sandostatina®

>
Bruna F. L. Guerreiro
Mariana N. José

From Somatostatin to Sandostatin®.

Sandostatin® was the first drug available for the treatment of acromegaly, a rare disease that disturbs the patient's quality of life and with the capacity to decrease their life expectancy. Octreotide acetate, discovered in 1982 by Bauer and his team, is the active principle of this drug and was commercialized for the first time in 1988 after obtaining good pharmacodynamic, pharmacokinetics, toxicological and clinical results, which will be further discussed. This compound mimetizes the natural ligand responsible for regulating excreted GH levels. It shows high specificity and activity ($ID_{50} = 125 \mu\text{g}/\text{kg}$ per hour), a higher therapeutic time of action ($t_{1/2} = 117 \text{ min.}$), and a potency 70 times higher than the ligand.

A Sandostatina® foi o primeiro fármaco disponível para o tratamento de doentes com acromegalia, uma doença rara que condiciona em grande parte a vida dos pacientes, chegando a reduzir significativamente a sua esperança média de vida. O seu princípio ativo, o acetato de octreotida, foi descoberto pela primeira vez em 1982 por Bauer e a sua equipa, tendo o fármaco começado a ser comercializado em 1988 após realizados com sucesso todos os estudos de farmacodinâmica, farmacocinética, de toxicidade e clínicos, os quais são abordados neste artigo. Este composto mimetiza o ligando natural responsável pela regulação dos níveis da hormona de crescimento (GH) excretada, contudo apresenta alta especificidade e atividade ($ID_{50} = 125 \mu\text{g}/\text{kg}$ por hora), um período terapêutico maior ($t_{1/2} = 117 \text{ min.}$) e uma potência 70 vezes superior à do ligando.

Acromegalia

O nome acromegalia deriva das palavras gregas “acro” (extremidade) e “megália” (grande), o que reflete a sua característica mais comum: o crescimento desproporcional do esqueleto, tecidos e órgãos [1,2]. Esta é uma desregulação hormonal rara, derivada da presença de um tumor benigno, conhecido como adenoma, na glândula pituitária. A glândula pituitária, localizada no cérebro, produz hormonas responsáveis pelo controlo do crescimento, reprodução e metabolismo, como é o caso da hormona de crescimento (GH, do inglês *growth-hormone*), que posteriormente entram numa cascata de reações. Por ação da hormona de libertação da GH (GHRH, do inglês *growth-hormone releasing hormone*), a GH é libertada a partir do hipotálamo e segregada para a corrente sanguínea, induzindo a produção do fator de crescimento semelhante à insulina do tipo I (IGF-I, do inglês *insulin-like growth factor I*) pelo fígado, sendo esta a hormona responsável pelo crescimento dos tecidos. Numa pessoa saudável, os níveis de GHRH, GH e IGF-I têm a capacidade de se regular através de um mecanismo de *feedback* negativo, no entanto, em pessoas com acromegalia este mecanismo de regulação falha, levando a uma produção contínua de GH que, por sua vez, irá aumen-

tar os níveis de IGF-I e levar ao crescimento excessivo de tecidos e órgãos [1-3].

Em crianças, a acromegalia tende a causar um crescimento incomum, conhecido como gigantismo, que geralmente não ocorre em adultos. Nestes últimos, os principais sintomas desenvolvidos são, por exemplo, a proeminência da estrutura óssea facial, aumento do espaçamento entre os dentes e dificuldade em fechar completamente a boca, entre outros mais perigosos como a diabetes de tipo 2 [3], tensão arterial elevada, artrite, risco elevado de doenças cardiovasculares e pólipos no cólon, que podem originar cancro colorretal se não forem removidos [1,2].

O primeiro passo para diagnosticar acromegalia centra-se na realização de testes bioquímicos, no entanto, considerando que os níveis de GH são estimulados por fatores externos, como por exemplo, exercício físico ou gravidez, o recomendado é verificar os níveis de IGF-1 em simultâneo com a capacidade de suprimir os níveis de GH e, para tal, utilizam-se testes orais de tolerância à glucose (OGTT, do inglês *oral glucose tolerance test*). Também se recorre a testes radiológicos, como a ressonância magnética, que permitem identificar e avaliar as características do adenoma [4].

Tratamento

Após o diagnóstico, a etapa seguinte deve incidir sobre a escolha do método de tratamento mais eficaz e adequado ao paciente em questão, o que pode ser feito através de uma cirurgia para a eliminação do adenoma hipofisário e/ou através de algumas sessões de radioterapia, contudo, a intervenção cirúrgica pode não ser uma opção, quer por rejeição do paciente ou impossibilidade da sua concretização, bem como por ser ineficaz, levando à persistência tumoral. Face a tal cenário surge um terceiro e último método de tratamento, baseado na administração de fármacos com capacidade de atenuar os sintomas associados à doença, tornando urgente, e foco de estudo para muitos grupos de investigação, o desenvolvimento de um composto que permita regularizar os níveis de GH e diminuir o diâmetro do adenoma [3].

Da somatostatina à octreotida

Existem várias estratégias que foram adotadas no desenvolvimento de um fármaco compatível ao combate da acromegalia, que vão desde o uso de antagonistas do recetor de GH, até ao uso de agonistas do recetor da dopamina [3]. No presente artigo, será dado ênfase à utilização de agonistas dos recetores de somatostatina, mais concretamente, à utilização da octreotida, um potente regulador dos níveis de GH excretada.

Para além da regulação por *feedback* negativo dos níveis de GH, existem outras respostas biológicas com capacidade regulatória, nomeadamente a resposta das células que estão na presença de recetores de somatostatina, uma hormona produzida no hipotálamo e que inibe a produção/libertação de GH para o sangue. Atualmente são conhecidos cinco subtipos diferentes destes recetores, entre os quais dois, o SSTR2 e o SSTR5, que estão presentes nas células do adenoma hipofisário [1]. Assim, e tendo em consideração que em pacientes diagnosticados com acromegalia o tempo de vida da somatostatina é insuficiente para contrariar o excesso de GH libertado pelas células tumorais, o uso de medicamentos cujo composto ativo seja um análogo à somatostatina torna-se uma possível estratégia.

A somatostatina é um tetradecapéptido cíclico, cuja sequência de aminoácidos que a constitui pode ser representada por H-Ala-Gly-Cys-Lys-Asn-Phe-Phe-Trp-Lys-Thr-Phe-Thr-Ser-Cys-OH (SS-14), dentro da qual, através de estudos de inibição desta hormona, é possível destacar o fragmento Phe7-Trp8-Lys9-Thr10 como essencial à sua atividade biológica, conhecido cientificamente por farmacóforo [5,6].

Uma vez determinado o farmacóforo da molécula guia (hormona natural), surgiu uma corrida à busca de análogos potentes e com propriedades farmacológicas interessantes, tendo sido adotadas várias estratégias, desde reduzir a extensão da sua estrutura primária ao essencial, substituir os aminoácidos naturais pelos res-

petivos enantiómeros ou por aminoácidos diferentes, até modificar alguns resíduos terminais, todas com o objetivo de otimizar as interações com o alvo biológico, aumentar o tempo de vida em relação à somatostatina e, conseqüentemente, melhorar a atividade inibitória do recetor responsável pela produção da hormona de crescimento, normalizando assim os níveis desta última em organismos humanos incapazes de o realizar, como é o caso dos doentes com acromegalia.

Assim, e com base em estudos anteriores elaborados pelo grupo de investigação de J. Rivier [7], foi sintetizado por Bauer e a sua equipa [8] o octapéptido D-Phe-Cys-Phe-D-Trp-Lys-Thr-Cys-Thr(ol), designado por SMS-201995 ou octreotida, que demonstrou alta especificidade, um período de tempo terapêuticamente adequado e elevada atividade para a inibição da produção da hormona de crescimento.

O processo sintético iniciou-se com o hexapéptido cíclico sintetizado por Vale *et al.* [7], já com a conformação adequada, no qual se introduziram modificações no C- e N-terminal (Tabela 1).

Tabela 1 - Resultados experimentais obtidos para os diferentes análogos sintetizados, em relação aos obtidos para a somatostatina. Adaptado dos resultados obtidos por Bauer *et al.* [8].

Composto	N-terminal	C-terminal	EC ₅₀ <i>in vitro</i>	EC ₅₀ <i>in vivo</i>
Somatostatina	-	-	100	100
A	H-	D-Ser(NH ₂)	3,3	< 0,1
B	D-Phe	NH ₂	4	165
C	D-Phe	D-Thr(NH ₂)	47	1160
Octreotida	D-Phe	Thr-ol	300	7000

As adições nas posições N-terminais demonstraram ser mais vantajosas, nomeadamente a adição de uma D-fenilalanina na posição N-terminal e de uma D-treonina na posição C-terminal, dando assim origem a um péptido de oito aminoácidos. A adição representada pela entrada B (Tabela 1) foi realizada com o intuito de mimetizar a hormona natural, permitindo um melhor “encaixe” na região de ligação compatível com o anel aromático e protegendo a ponte dissulfureto do ataque enzimático, demonstrando, por isso, 4% da atividade da somatostatina *in vitro* e semelhante atividade *in vivo*. Adicionalmente, verificou-se que a adição de D-treonina em C-terminal permitiu um incremento dos valores de EC₅₀ (C). Assim, procedeu-se à síntese de um péptido com ambas as modificações mencionadas, mas cuja D-treonina terminal foi convertida num aminoálcool, dando assim origem à octreotida, um composto 70 vezes mais potente na inibição da GH *in vivo* e três vezes mais potente *in vitro* [8], quando comparada com a somatostatina.

Os estudos de cristalização demonstraram que a estrutura final é estabilizada através de pontes de hidrogénio intra- e intermoleculares que se formam

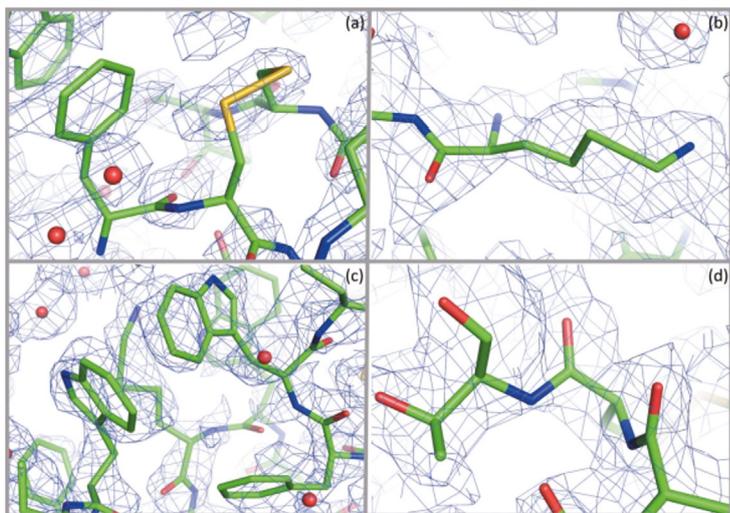
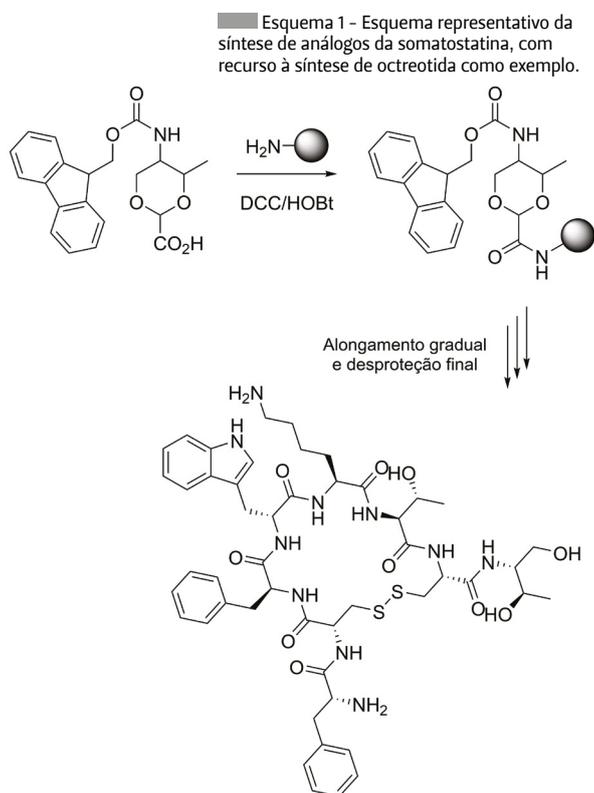


Figura 1 - Modelo estrutural da octreotida com diferentes focos: (a) D-fenilalanina e ponte dissulfureto, (b) L-lisina, (c) Resíduos de D-triptofano e L-fenilalanina vizinhos, (d) treonina reduzida, retirada de Fili *et al.* [10] e reproduzido com a permissão da *International Union of Crystallography*.

na presença de água, responsáveis pela adoção de uma conformação alternativa (Figura 1) [9,10].

A síntese destes análogos (Esquema 1) foi realizada através de técnicas convencionais de condensação de fragmentos, utilizando uma resina como suporte. A purificação dos análogos, para os sucessivos estudos *in vivo* e *in vitro* recorreu a técnicas de TLC e HPLC.



Estudos farmacodinâmicos e farmacocinéticos

Em termos metabólicos, a octreotida demonstrou possuir maior estabilidade à degradação enzimática que a somatostatina, uma vez que o fármaco possui um resíduo de D-Phe no N-terminal e um aminoálcool no C-terminal, que a protegem da ação enzimática [11], como já referido anteriormente. Para além do mais, a octreotida é pouco permeável no fígado, o que dificulta que este a extraia e metabolize [12]. A junção destes fatores faz com que o fármaco possua uma duração de ação prolongada, o que pode ser comprovado através do seu tempo de meia-vida, cujo valor é de 117 minutos, bastante superior ao valor da somatostatina, que possui um tempo de meia-vida inferior a 1 minuto [12].

Os estudos *in vivo* foram feitos pelo grupo de investigação de Marbach [9] através de *radiolabeling*, permitindo aferir que o composto não só se distribui rapidamente, como possui uma estabilidade metabólica significativa, uma vez que 20 a 50% da dose aplicada foi excretada intacta, sendo o trato intestinal a maior causa da sua degradação. Relativamente à atividade, verificou-se que a octreotida é oralmente ativa, possuindo um ID_{50} de 125 $\mu\text{g}/\text{kg}$ por hora em ratos anestesiados.

Os efeitos farmacodinâmicos foram primeiramente estudados em ratos e, posteriormente, em macacos *rhesus* (Tabela 2).

Tabela 2 - Resposta inibitória a diferentes tempos após administração de somatostatina e de octreotida a macacos *rhesus*. Adaptado de Bauer *et al.* [8].

Tempo (min.)	ID_{50} Somatostatina ($\mu\text{g}/\text{kg}$)	ID_{50} Octreotida ($\mu\text{g}/\text{kg}$)
15	5,6	0,08
30	26	0,08
60	759	0,34

Estes resultados demonstram que a octreotida é pelo menos 70 vezes mais potente a inibir a GH *in vivo*, enquanto corroboram a ideia de que o fármaco possui uma duração de ação superior à do análogo natural. Os testes foram replicados em macacos *rhesus* e os resultados obtidos coincidiram com os apresentados. Para além do mais, considerando que a introdução do fármaco no organismo humano por meio de injeção não altera a secreção de insulina, é ainda possível concluir que, nas condições experimentais descritas, se está perante um composto extremamente seletivo [8]. Tal afirmação é suportada por estudos de radioatividade, nos quais foi possível verificar que a eliminação do péptido nos órgãos alvo é bastante mais lenta

do que nos restantes tecidos, o que demonstra a afinidade do composto para os recetores alvo [12], ligando-se preferencialmente aos recetores SSTR5 e SSTR2 e regulando a sua ação farmacológica maioritariamente por meio deste último [13].

Em estudos de toxicidade, o composto não demonstrou evidências de ser um potencial mutagénico ou genotóxico, nem comprometeu a reprodução, tendo ainda sido possível verificar que alguns ratos administrados com o composto cresceram pouco, considerando-se esta evidência uma consequência da inibição da GH [9].

Estudos clínicos

Os estudos clínicos de fase I realizados por Ezzat *et al.* [14] permitiram garantir a eficiência da octreotida, uma vez que pacientes administrados com placebo não sofreram qualquer tipo de melhoria, enquanto que no grupo ao qual o fármaco foi administrado se verificou um decréscimo de cerca de 71 e 93% dos níveis de GH e IGF-1, respetivamente. Já nos estudos de fase II foi possível averiguar que a melhoria da eficácia terapêutica advém de uma administração com maior frequência e não de maiores dosagens. Os estudos clínicos desta fase permitiram ainda determinar que o fármaco diminuiu o tamanho do tumor de mais de metade dos 99 pacientes considerados, estando esta redução diretamente relacionada com a supressão de GH e IGF-1.

Por fim, foi também possível suportar a ideia de que a octreotida tem a capacidade de atenuar vários dos sintomas clínicos expressos em pessoas afetadas com acromegalia. A sua seletividade foi comprovada nos estudos publicados por Di Bartolomeo *et al.* [15], nos quais a octreotida foi envolvida no tratamento de tumores metastáticos neuroendócrinos e no qual foi possível averiguar que apenas tumores com recetores de somatostatina respondem ao tratamento.

Otimização e outras perspetivas

Ainda que os resultados tenham sido de sucesso e bastante positivos, as investigações não pararam e, anos mais tarde, uma nova fórmula foi apresentada, a Sandostatina LAR[®], uma versão de ação mais duradoura da Sandostatina[®]. Assim, em 1988 foi aprovada pela FDA (*Food and Drug Administration*) a Sandostatina[®], administrada por injeção subcutânea e em 1998 a Sandostatina LAR[®], agora administrada por injeção intramuscular, otimização esta adaptada aos pacientes, uma vez que a nova fórmula permitiu a realização de apenas uma administração por mês (1x4 semanas), enquanto que a primeira exigia várias administrações diárias. Mais recentemente, em junho de 2020, um novo medicamento de toma oral foi

aprovado para o tratamento de doentes adultos com acromegalia, a Mycapssa[®], que envolve uma estratégia de libertação lenta e controlada do princípio ativo, o acetato de octreotida [16].

Conclusão

No presente artigo foi descrito o processo de *design* e desenvolvimento da octreotida, o princípio ativo da Sandostatina[®]. Este fármaco encontra-se disponível comercialmente para o tratamento de acromegalia, uma doença que, devido a um adenoma hipofisário, produz descontroladamente GH, o que promove um aumento dos níveis de IGF-1 e, conseqüentemente, promove o crescimento excessivo dos tecidos e órgãos.

De entre as várias estratégias disponíveis, a octreotida advém da utilização da somatostatina, hormona natural responsável pela regulação dos níveis de GH, como molécula guia. Com base na informação retirada de estudos realizados por RMN e cristalografia foi possível compreender as interações ligando/recetor estabelecidas naturalmente e, conseqüentemente, simplificar e otimizar a sua estrutura, tendo-se obtido excelentes resultados que levaram à aprovação do fármaco pela FDA em 1988. Atualmente estão disponíveis mais dois medicamentos, cujo princípio ativo é também o acetato de octreotida e que diferem na dose e na sua forma de administração, o que demonstra o excelente trabalho que tem vindo a ser desenvolvido pelos químicos medicinais na procura rápida de adaptações e soluções que melhorem a qualidade de vida do ser humano.

Agradecimentos

É essencial começar os agradecimentos mencionando a excelente instituição que nos licenciou e que nos continua a acolher no mestrado, a Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade NOVA de Lisboa. Em especial, gostaríamos de agradecer à Professora Doutora Maria Manuel Marques que, para além de uma investigadora irrepreensível, é uma professora incansável. Agradecemos desde já o apoio e, acima de tudo, toda a disponibilidade dispensada.

Referências

- [1] S. Melmed, *Acromegaly*, in S. Melmed (Ed.), *The Pituitary*, Elsevier, Academic Press **2017**, pp 423-466.
- [2] P. Chanson, S. Salenave, *Orphanet J. Rare Dis.* **2008**, 3, 17. DOI: 10.1186/1750-1172-3-17.
- [3] S. Melmed, *New Engl. J. Med.* **2006**, 355, 2558-2573. DOI: 10.1056/nejmra062453.
- [4] L. Katznelson, J. L. D. Atkinson, D. M. Cook, S. Z. Ezzat, A. H. Hamrahian, K. K. Miller, *Endocr. Pract.* **2011**, 17, 1-44. DOI: 10.4158/EP.17.S4.1.
- [5] W. Kazmierski, W. S. Wire, G. K. Lui, R. J. Knapp, J. E. Shook, T. F. Burks, H. I. Yamamura, V. J. Hruby, *J. Med. Chem.* **1988**, 31, 2170-2177. DOI: 10.1021/Jm00119a019.
- [6] W. Vale, M. Brown, C. Rivier, M. Perrin, J. Rivier, *Development and Applications of Analogs of LRF and Somatostatin*, in A. M. Gotto Jr, E. J. Peck, A. E. Boyd (Eds.), *Brain Peptides: A New Endocrinology*, Elsevier/North Holland Biomedical Press, Amsterdam, **1977**, pp. 71-88.
- [7] J. Rivier, P. Brazeau, W. Vale, R. Guillemin, *J. Med. Chem.* **1975**, 18, 123-126. DOI: 10.1021/jm00236a001.
- [8] W. Bauer, U. Briner, W. Doepfner, R. Haller, R. Huguenin, P. Marbach, T. J. Petcher, J. Pless, *Life Sciences* **1982**, 31, 1133-1140. DOI: 10.1016/0024-3205(82)90087-X.
- [9] P. Marbach, W. Bauer, D. Bodmer, U. Briner, C. Bruns, I. Lancranjan, J. Pless, F. Raulf, B. Stolz, P. Vit, G. Weckbecker, A. Kay, R. Robinson, J. Sharkey, T. Soranno, *Discovery and Development of Somatostatin Agonists*, in R. T. Borchardt, R. M. Freidinger, T. K. Sawyer, P. L. Smith (Eds.) *Integration of Pharmaceutical Discovery and Development*, Pharmaceutical Biotechnology, Kluwer Academic Publishers, Boston, **2002**; Vol. 11, pp 183-209. DOI: 10.1007/0-306-47384-4_9.
- [10] S. Fili, A. Valmas, M. Spiliopoulou, P. Kontou, A. Fitch, D. Beckers, T. Degen, K. Barlos, K. K. Barlos, F. Karavassili, I. Margioliaki, *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **2019**, 75, 611-620. DOI: 10.1107/S2052520619006012.
- [11] A. Janecka M. Zubrzycka, T. Janecki, *J. Pept. Res.* **2001**, 58, 91-107. DOI: 10.1034/j.1399-3011.2001.00873.x.
- [12] P. Marbach, U. Briner M. Lemaire, A. Schweitzer, T. Terasaki, *Digestion* **1993**, 54, 9-13. DOI: 10.1159/000201068.
- [13] R. M. Paragliola, R. Salvatori, *Front. Endocrinol.* **2018**, 9, 78. DOI: 10.3389/fendo.2018.00078.
- [14] S. Ezzat, P. J. Snyder, W. F. Young, L. D. Boyajy, C. Newman, A. Klibanski, M. E. Molitch, A. E. Boyd, L. Sheeler, D. M. Cook, W. B. Malarkey, I. Jackson, M. L. Vance, M. O. Thorner, A. Barkan, L. A. Frohman, S. Melmed, *Ann. Intern. Med.* **1992**, 117, 711-718. DOI: 10.7326/0003-4819-117-9-711.
- [15] M. Di Bartolomeo, E. Bajetta, R. Buzzoni, L. Mariani, C. Carnaghi, L. Somma, N. Zilembo, A. Di Leo, *Cancer* **1996**, 77, 402-408. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0142(19960115)77:2<402::AID-CNCR25>3.0.CO;2-4.
- [16] Drugs.Com: *FDA Approves Mycapssa*, [drugs.com/newdrugs/fda-approves-mycapssa-octreotide-oral-somatostatin-analog-acromegaly-5279.html](https://www.drugs.com/newdrugs/fda-approves-mycapssa-octreotide-oral-somatostatin-analog-acromegaly-5279.html) (acedido em 05/01/2023).

>

Bruna F. L. Guerreiro

NOVA School of Science and Technology (FCT-NOVA).

Bruna Guerreiro é licenciada em Química Aplicada pela NOVA School of Science and Technology (2018-2021) e encontra-se inscrita no segundo ano do mestrado em Química Bioorgânica na mesma instituição. Encontra-se a realizar a tese de mestrado com o tema "Unexplored metal-catalysed route towards azaindoles". Possui como áreas de maior interesse a química orgânica e a química medicinal.

bf.guerreiro@campus.fct.unl.pt

ORCID.org/0009-0005-8852-0071

>

Mariana N. José

NOVA School of Science and Technology (FCT-NOVA).

Mariana José é licenciada em Química Aplicada pela NOVA School of Science and Technology (2018-2021) e encontra-se inscrita no segundo ano do mestrado em Química Bioorgânica na mesma instituição. Encontra-se a realizar a tese de mestrado com o tema "Development of a beneficial metformin drug delivery system using sustainable technologies". Os seus principais interesses centram-se no desenvolvimento de novos sistemas de entrega de fármacos e engenharia de partículas.

mn.jose@campus.fct.unl.pt

ORCID.org/0009-0000-2014-1140

ULYSSES: Química Semi-Empírica para Macrossistemas

>

Filipe Meneses*
Grzegorz M. Popowicz

ULYSSES: Semi-Empirical Quantum Chemistry for Macrosystems. *We introduce the ULYSSES library to the Portuguese chemical community. ULYSSES is a simple yet efficient semi-empirical library for C++. It is structured to be easy to use and extend to other methods or parameterizations. Its development focused on offering users the maximum freedom possible while simultaneously simplifying technical issues like installation. Several semi-empirical methods with corrections for London forces are available in its current release version. Modules for thermodynamics, electronic properties, structure optimization and molecular dynamics are also implemented. Some published applications are also briefly described, just like future developments, which will be highly valuable for the medicinal chemistry, drug discovery and artificial intelligence communities.*

No presente documento apresenta-se a biblioteca ULYSSES aos químicos portugueses. A ULYSSES é uma biblioteca de métodos semi-empíricos de Química Quântica, desenhada para ser fácil de usar e expandir a outros métodos ou parametrizações. Apesar da sua simplicidade, a biblioteca apresenta elevada eficiência computacional. O desenvolvimento do código teve como foco oferecer aos utilizadores o máximo de liberdade possível, procurando ainda disponibilizar uma experiência simples em detalhes técnicos, tais como a sua instalação. Na versão atualmente publicada, a biblioteca oferece acesso a diversos métodos semi-empíricos com correções para interações de London. A biblioteca tem ainda disponíveis módulos para o cálculo de propriedades termodinâmicas, eletrônicas, otimização de estruturas e de dinâmica molecular. Alguns exemplos de aplicações já publicadas são descritos brevemente, bem como os desenvolvimentos que irão surgir com as próximas versões da biblioteca. Prevê-se que alguns dos algoritmos que serão lançados em breve terão um grande impacto na comunidade de química medicinal, no desenvolvimento de fármacos e na inteligência artificial.

Introdução

A necessidade de métodos de cálculo cada vez mais eficientes é uma questão premente para os cientistas computacionais. A dimensão média dos sistemas estudados tem crescido a uma velocidade impressionante: na década de 1990, cálculos semi-empíricos em moléculas orgânicas de dimensões médias (sistemas típicos tratados por químicos orgânicos e organometálicos experimentalistas) eram facilmente acessíveis aos químicos computacionais [1]; na década seguinte, cálculos usando a teoria do funcional da densidade (DFT) em tais sistemas eram considerados *state-of-the-art* [2], enquanto os métodos semi-empíricos entravam no campo da bioquímica [3]. Atualmente, já foram efetuados os primeiros cálculos em pequenas proteínas utilizando um dos níveis mais elevados da teoria *ab initio* [4], o método *Coupled Cluster* com tratamento perturbacional de excitações triplas (CCSD(T)). Cálculos em complexos organometálicos com estrutura eletrônica complexa já foram também reportados [5]. Tais avanços

foram possíveis com a introdução de métodos de linearização do custo computacional com o aumento das dimensões dos sistemas [3,5-7].

Apesar do progresso evidenciado, estes cálculos não se tornaram ainda comuns pois não podem ser utilizados para o estudo da dinâmica de sistemas químicos “mais reais”, onde têm de ser calculados milhares de milhões de pontos ao longo de uma superfície de energia potencial molecular (PES). O cálculo da função de onda CCSD(T) da proteína crambina [4] necessitou de aproximadamente um mês de tempo de cálculo num *cluster* de computadores para obtenção de um só ponto de energia, excluindo o tempo de cálculo da função de onda *Hartree-Fock* (HF). No caso de estados excitados, o cálculo está também completamente fora do alcance de aplicações não estáticas, onde a otimização da função de onda de alto nível necessita de aproximadamente seis horas de cálculo em *cluster* [5]. Por este motivo é necessário recorrer a métodos de química quântica,

cujo custo computacional seja mais modesto, tais como DFT, HF ou até mesmo métodos semi-empíricos.

O problema associado a estes métodos está na descrição de interações não covalentes [8,9]. Apesar de oferecerem descrições razoavelmente adequadas para forças eletrostáticas e de indução, todos estes métodos mais aproximados falham na descrição de forças de dispersão ou de London. Vejamos: a teoria HF, por definição, não pode descrever estas forças pois não contém correlação eletrônica; a teoria DFT falha também na descrição das interações de London (exceto no caso em que os funcionais são ajustados especificamente para incluir tais efeitos, como o funcional M06-2X [10]) devido ao carácter aproximado do potencial de correlação e permuta; os métodos semi-empíricos, sendo reformulações simplificadas dos métodos anteriores, falham também na descrição de tais forças. Adicionalmente, também os métodos *ab initio* se mostram não adequados na descrição de forças de London. O caso mais comum é o fracasso do método MP2 na descrição de interações por emparelhamento π (π - π *stacking*) [8].

Nas últimas décadas têm sido desenvolvidas correções empíricas para incluir efeitos de dispersão em métodos DFT, HF e semi-empíricos. Talvez as correções atualmente mais utilizadas sejam as de Grimme [11], cujo último método, D4, já foi incluído na otimização de densidades eletrônicas semi-empíricas [12].

No presente manuscrito é apresentada, à comunidade química portuguesa, a biblioteca ULYSSES [13], um pacote semi-empírico desenhado para permitir o cálculo rápido e eficiente de sistemas de grandes dimensões com o mínimo impacto possível na exatidão. A biblioteca foi desenvolvida para se focar nas comunidades não teóricas: da química-física computacional à química macromolecular, da bioquímica ao desenvolvimento de fármacos.

Descrição da Biblioteca

A descrição da implementação da biblioteca ULYSSES foi efetuada recentemente [13]. Aqui apresentam-se os detalhes com maior relevância para uma audiência geral. Na biblioteca ULYSSES foram implementados diversos métodos semi-empíricos da família NDDO, tais como o MNDO [14], MNDOd [15], MNDO-PDDG [16], AM1 [17], PM3 [18], PM3-BP [19], PM3-PDDG [16,20], PM6 [21] e RM1 [22]. Foi também implementado um método semi-empírico baseado em DFT, o GFN2-xTB [12]. Comum a quase todos os métodos implementados é a disponibilidade de correções para forças de London e eventualmente pontes de hidrogénio. O método GFN2-xTB foi desenvolvido para incluir tais efeitos já no cálculo da densidade eletrônica. Para os métodos NDDO, estão incluídas as correções D3H4 [23] e D3H+ [24]. Espera-se que o número de métodos que atualmente carecem de

compatibilidade com tais correções possa reduzir num futuro próximo. De interesse particular são os métodos PM6 e GFN2-xTB, pois estão parametrizados para quase toda a Tabela Periódica.

Tal como qualquer outro pacote de química quântica, a biblioteca ULYSSES está equipada com um otimizador de geometria. Tirando proveito da flexibilidade oferecida pela linguagem de programação C++, estão implementadas mais de 100 combinações distintas de métodos numéricos de otimização [25]. Estes vão desde métodos simples, tais como o gradiente conjugado, a métodos quasi-Newton mais eficientes. Está também incluída a opção de otimização de estados de transição usando o método de Baker [26]. Para exploração de propriedades dinâmicas, está ainda incluída a possibilidade de realização de cálculos de Dinâmica Molecular de Born-Oppenheimer (BOMD) [27], *i.e.*, dinâmica molecular tendo por base a PES semi-empírica. Para sistemas com estruturas de equilíbrio flexíveis, é conveniente a utilização de técnicas de aceleração. Para essas situações, a biblioteca ULYSSES inclui a possibilidade de utilizar metadinâmica [28].

O cálculo de propriedades foi outro ponto considerado relevante para o desenvolvimento da biblioteca. Nesta, estão incluídas funções que permitem o acesso simples a propriedades eletrônicas, tais como entalpias de formação, cargas parciais [29], momentos dipolares, polarizabilidades atômicas [12], índices de reatividade [30], análise populacional [31], potenciais de ionização e afinidades eletrônicas. Algumas destas propriedades podem ainda ser seguidas durante um estudo de dinâmica molecular. Está incluído também um módulo para o cálculo de propriedades termodinâmicas de gases ideais, adaptado especificamente para o caso de sistemas flexíveis. Estes apresentam tipicamente dificuldades de estabilidade matemática no cálculo de entropias. Porém, com o recurso a correções especiais [32] é possível resolver o problema da divergência no cálculo desta função de estado, com base na aproximação pseudo-harmônica. Contudo, somente a correção para a entropia se encontrava descrita na literatura. Entretanto, nesta biblioteca estendeu-se a sua aplicação a outras funções de estado, tais como, por exemplo, entalpias, a partir das respetivas funções de partição. As funções de partição foram ainda adaptadas a sistemas multi-estruturais de modo a permitir o cálculo de propriedades termodinâmicas de sistemas descritos por vários conformémeros. A informação essencial de cada sistema molecular pode ainda ser guardada numa base de dados que poderá ser personalizada pelo utilizador. Valores de variáveis intermédias necessárias ao cálculo da termodinâmica de gases ideais (frequências vibracionais e momentos de inércia) estão também acessíveis.

Tal como já referido, a biblioteca foi escrita em linguagem C++. O uso de uma linguagem de programação

moderna permite uma estrutura mais organizada que facilita a sua expansão em novos módulos ou funcionalidades. No entanto, a implementação em C++ traz ainda uma outra vantagem. A ULYSSES foi escrita de modo a ser uma biblioteca *header-only* de métodos semi-empíricos. As duas grandes consequências são: 1) o utilizador ganha liberdade total para construir os seus próprios programas, estando estes em perfeita harmonia e adaptados ao modo específico de trabalho de cada utilizador (o programa adapta-se ao utilizador e não o utilizador ao programa); 2) o esforço de pré-instalação de componentes necessários para o uso da ULYSSES é mínimo, pois é apenas necessário um compilador de C++. Com o primeiro ponto, a ULYSSES oferece a flexibilidade tipicamente desejada por utilizadores com conhecimentos avançados em programação e em química computacional. Por outro lado, o segundo ponto permite que utilizadores sem experiência em programação possam também usufruir da biblioteca. Para este fim, são disponibilizados em conjunto com a biblioteca ULYSSES alguns programas modelo que podem ser compilados por qualquer utilizador. Para programas mais abrangentes ou construções especiais, sugere-se ao leitor que contacte os autores, que disponibilizarão programas adaptados aos seus requisitos computacionais.

A ULYSSES está disponível no link github.com/sirrius/ulysses.git sob a licença AGPL3 [33]. Isto significa que todo o código está acessível ao público geral sem qualquer custo adicional.

Benchmarks

A publicação principal da biblioteca contém uma comparação extensa dos vários métodos nela implementados [13]. Aí demonstra-se que os módulos de métodos semi-empíricos disponíveis na biblioteca ULYSSES reproduzem os resultados obtidos com outros programas de acesso geral, com a vantagem de que esta biblioteca oferece uma base comum para os diversos métodos e técnicas de cálculo. Isto permite uma comparação direta dos resultados e evita a necessidade de trabalhar e conectar diversos programas e bibliotecas em simultâneo. Na mesma publicação descreve-se ainda a eficiência da utilização da ULYSSES em vários sistemas: o cálculo de funções de onda numa biblioteca com quase 134 000 estruturas, QM9 [34], necessitou apenas de seis horas de computação; propriedades eletrónicas de pequenas proteínas – até 1300 átomos – necessitaram de 10 a 45 minutos, dependendo, naturalmente, do método e das condições utilizadas. Para dar ao leitor um ponto de comparação, recorreu-se ao sistema do dímero do coranuleno ($C_{60}H_{28}$, em inglês, *corannulene pincer* ou *buckycatcher*): o cálculo da energia utilizando uma variante linear do método CCSD(T) e uma base de orbitais *triple zeta* requer mais de quatro dias e quatro horas de cálculo intensivo; por outro lado, um cálculo idêntico

usando um método DFT (M06-2X) necessita de cerca de três horas e 30 minutos. Com a ULYSSES, a otimização da geometria do *buckycatcher* necessita de menos de 45 segundos (66 iterações no total, ou seja, pelo menos 66 cálculos de energia). Salienta-se, no entanto, que a biblioteca ainda não está paralelizada. A paralelização, que será descrita numa das publicações futuras, melhorará significativamente a eficiência e diminuirá os tempos de cálculo. Para mais detalhes sobre a eficiência da implementação, o leitor poderá consultar a publicação oficial da biblioteca ULYSSES [13].

A versatilidade da biblioteca está demonstrada em algumas publicações recentes. A ULYSSES foi utilizada para explicar observações experimentais que aparentavam ser contraditórias, nomeadamente a observação de entalpias e entropias de complexação positivas em calixarenos [35], resultado teoricamente inesperado pois envolve a formação de complexos por adição. Verificou-se, via solvatação explícita, que este resultado era causado por efeitos de solvente. A ULYSSES foi aplicada também no cálculo de dados termodinâmicos para uma rede de reações relevantes na hidrólise do dióxido de nitrogénio [36]. Apesar do impacto ambiental e tecnológico, dados de elevada precisão para este sistema são escassos ou mesmo inexistentes. Com base em dados teóricos, foi construído um modelo bifásico, o que permitiu seguir as concentrações de equilíbrio das várias espécies no sistema reativo em diversas condições. Foi abordado também o sistema do *buckycatcher* com fulerenos C60 e C70 [37,38]. Não só se verificou que os cálculos semi-empíricos estão a par com níveis de teoria mais elevados, como também foi obtida uma descrição não estática da formação destes complexos com base em estudos BOMD.

Neste documento pretende-se que o foco seja a exatidão oferecida por métodos semi-empíricos, apesar da sua simplicidade teórica. Na figura 1 apresentam-se energias de emparelhamento π para quartetos de bases de ADN [39]. A figura contém interações calculadas para 10 destes sistemas, comparando métodos semi-empíricos disponíveis na biblioteca ULYSSES com cálculos de alto nível *ab initio* (CCSD(T)). Facilmente se verifica que, na ausência das respetivas correções, a descrição de interações intermoleculares é pobre para qualquer um dos quartetos estudados. O método RM1 não prevê uma única interação atrativa, sendo observados desvios de até 20 kcal/mol face aos dados referência. Apesar do método PM6 calcular interações favoráveis, as respetivas energias de emparelhamento têm desvios em média de 10 kcal/mol. A inclusão da componente D3 corrige efetivamente todos os métodos. No caso do método RM1-D3H4, o desvio médio é reduzido para 3 kcal/mol, enquanto para PM6-D3H4X, o desvio médio é de 1,7 kcal/mol. Os melhores resultados foram obtidos usando

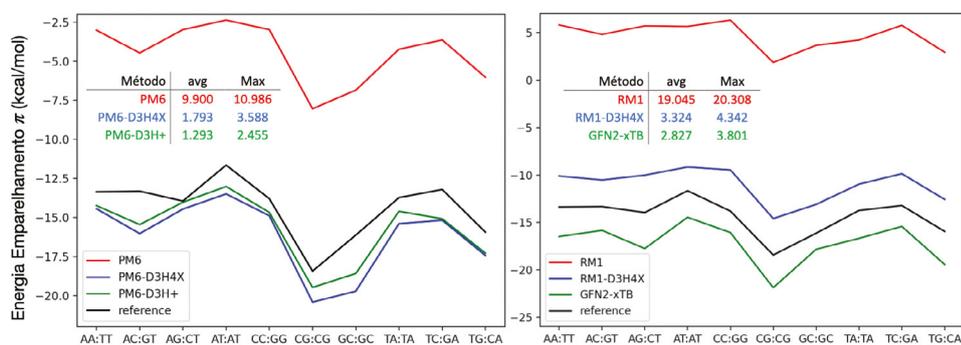
PM6-D3H+, onde o desvio médio é de 1,3 kcal/mol. O método GFN2-xTB obteve, neste caso, um desvio médio ligeiramente mais favorável do que o RM1-D3H4X. É importante salientar uma vez mais que a falta de exatidão de métodos semi-empíricos na descrição de forças de dispersão provém dos métodos HF e DFT. Aconselha-se ainda ao leitor o artigo de Hobza e Řezáč, onde é efetuada uma comparação de vários métodos semi-empíricos [9].

Desenvolvimentos futuros

Os próximos desenvolvimentos da biblioteca ULYSSES vão beneficiar maioritariamente as comunidades de química medicinal, de desenvolvimento de fármacos e de inteligência artificial. Está já disponível um algoritmo de otimização de estruturas que considera restrições de carácter experimental, tal como um modelo molecular de um complexo proteína-ligando obtido por cristalografia. O algoritmo pode ser aplicado em diversos tipos de cálculos relacionados com química medicinal e *drug discovery*, tais como o refinamento de estruturas experimentais, cálculo de tensão localizada, *in silico scaffold hopping*, ou até mesmo *docking* não *standard*, onde a flexibilidade da proteína ou do ligando podem ser controlados pelo utilizador. Existe ainda um algoritmo de decomposição

de energias de interação (EDA – *Energy Decomposition Analysis*) compatível com métodos semi-empíricos. Este método permite uma análise pormenorizada do equilíbrio entre diversas forças intermoleculares quando um complexo molecular se forma. O método desenvolvido permite mapear as contribuições específicas de cada átomo num ligando (ou proteína) para a formação do respetivo complexo. Tais mapas oferecem uma resolução atómica da descrição das interações entre moléculas, permitindo perceber qual o papel de cada grupo funcional para a formação do complexo intermolecular. A decomposição de energia permite ainda avaliar a complementaridade das superfícies de interação moleculares com base no cálculo explícito do impedimento estereoquímico. Como primeira aplicação do algoritmo [40], mostrou-se como a EDA racionaliza a afinidade de um dado inibidor em fase clínica perante três cinases distintas, auxiliando na construção de um modelo de seletividade para as diversas proteínas. Finalmente, está em fase final de desenvolvimento um módulo de transformação de SMILES [41] em estruturas tridimensionais, que virá acompanhado com os primeiros campos de forças. Com a implementação dos campos de forças planeia-se também adicionar a paralelização da biblioteca.

A



B

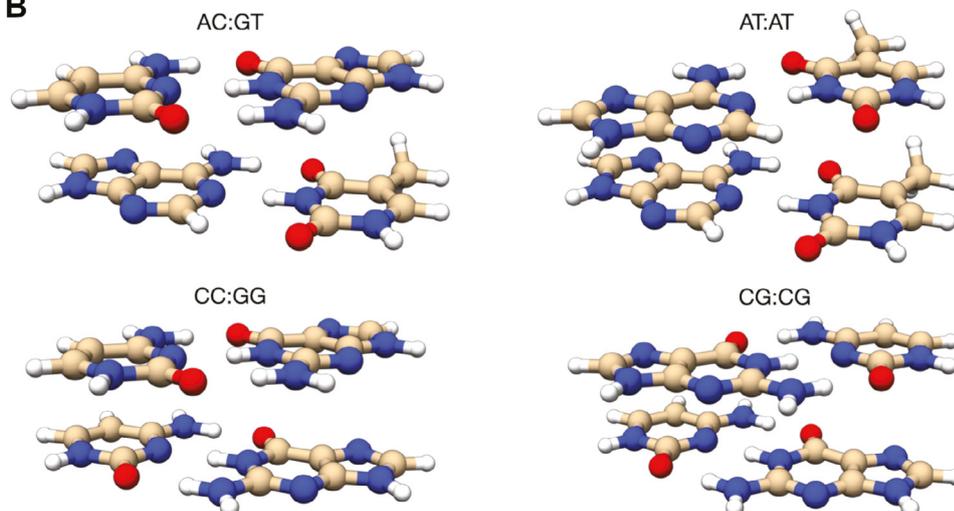


Figura 1 – (A) Energias de emparelhamento π para diferentes quartetos de bases de ADN (*avg*, desvio médio; *Max*, desvio máximo). (B) Exemplos de alguns dos quartetos de bases de DNA. Dados de referência obtidos da literatura [39].

Conclusão

Neste artigo é apresentada à comunidade química portuguesa a biblioteca ULYSSES, que foi escrita de modo a beneficiar diversas comunidades de ciências aplicadas, facilitando o acesso desses investigadores a cálculos que permitem descrições mais realistas de sistemas moleculares. O seu desenvolvimento focou-se num conjunto de métodos simples. A inclusão de correções de dispersão garante a qualidade do cálculo de energias de interação. Em diversas séries de cálculos documentados na literatura e também aqui, mostrou-se a eficiência e exatidão oferecidas pela

ULYSSES. Existe uma plena confiança de que, com os desenvolvimentos planeados a curto e médio prazo, esta biblioteca tornar-se-á numa ferramenta essencial para diversas comunidades científicas não teóricas.

Agradecimentos

O trabalho aqui descrito foi financiado pelo *Bundesministerium fuer Wirtschaft und Klimaschutz*, através do projeto KK 5197901TSO, e pelo *Bundesministerium fuer Bildung und Forschung*, através do projeto 031L0268 (SUPREME). Os autores gostariam ainda de agradecer o apoio do Dr. André Mourão na revisão do manuscrito.

Referências

- [1] M. Ventura, C. Segura, M. Solà, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1994**, 281–284. DOI: 10.1039/P29940000281.
- [2] F. M. C. Menezes, M. L. Kuznetsov, A. J. L. Pombeiro, *Organometallics* **2009**, 28, 6593–6602. DOI: 10.1021/om900513b.
- [3] J. J. P. Stewart, *Int. J. Quantum Chem.* **1996**, 58, 133–146. DOI: 10.1002/(SICI)1097-461X(1996)58:2%3C133::AID-QUA2%3E3.O.CO;2-Z.
- [4] C. Riplinger, B. Sandhoefer, A. Hansen, F. Neese, *J. Chem. Phys.* **2013**, 139, 134101. DOI: 10.1063/1.4821834.
- [5] F. Menezes, D. Kats, H. -J. Werner, *J. Chem. Phys.* **2016**, 145, 124115. DOI: 10.1063/1.4963019.
- [6] S. L. Dixon, K. M. Merz, *J. Chem. Phys.* **1997**, 103, 879–893. DOI: 10.1063/1.474386.
- [7] C. Riplinger, F. Neese, *J. Chem. Phys.* **2013**, 138, 034106. DOI: 10.1063/1.4821834.
- [8] J. G. Brandenburg, M. Hochheim, T. Bredow, S. Grimme, *J. Phys. Chem. Lett.* **2014**, 5, 4275–4284. DOI: 10.1021/jz5021313.
- [9] J. Hostaš, J. Řezáč, P. Hobza, *Chem. Phys. Lett.* **2013**, 568–569, 161–166. DOI: 10.1016/j.cplett.2013.02.069.
- [10] Y. Zhao, D. G. Truhlar, *Theor. Chem. Acc.* **2008**, 120, 215–248. DOI: 10.1007/s00214-007-0310-x.
- [11] E. Caldeweyher, S. Ehlert, A. Hansen, H. Neugebauer, S. Spicher, C. Bannwarth, S. Grimme, *J. Chem. Phys.* **2019**, 150, 154122. DOI: 10.1063/1.5090222.
- [12] C. Bannwarth, S. Ehlert, S. Grimme, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, 15, 1652–1671. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b01176.
- [13] F. Menezes, G. M. Popowicz, *J. Chem. Inf. Model.* **2022**, 62, 3685–3694. DOI: 10.1021/acs.jcim.2c00757.
- [14] M. J. S. Dewar, W. Thiel, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, 99, 4899–4907. DOI: 10.1021/ja00457a004.
- [15] a) W. Thiel, A. A. Voityuk, *Theor. Chim. Acta* **1992**, 81, 391–404. DOI: 10.1007/BF01134863.; b) W. Thiel, A. A. Voityuk, *J. Chem. Phys.* **1996**, 100, 616–626. DOI: 10.1021/jp952148o.
- [16] M. P. Repasky, J. Chandrasekhar, W. L. Jorgensen, *J. Comput. Chem.* **2002**, 23, 1601–1622. DOI: 10.1002/jcc.10162.
- [17] M. J. S. Dewar, W. Thiel, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, 99, 4899–4907. DOI: 10.1021/ja00457a004.
- [18] J. J. P. Stewart, *J. Comput. Chem.* **1989**, 10, 209–220. DOI: 10.1002/jcc.540100208.
- [19] T. J. Giese, E. C. Sherer, C. J. Cramer, D. M. York, *J. Chem. Theory Comput.* **2005**, 1, 1275–1285. DOI: 10.1021/ct050102l.
- [20] I. Tubert-Brohman, C. R. W. Guimarães, W. L. Jorgensen, *J. Chem. Theory Comput.* **2005**, 1, 817–823. DOI: 10.1021/ct0500287.
- [21] J. J. P. Stewart, *J. Mol. Model.* **2007**, 13, 1173–1213. DOI: 10.1007/s00894-007-0233-4.
- [22] G. B. Rocha, R. O. Freire, A. M. Simas, J. J. P. Stewart, *J. Comput. Chem.* **2006**, 27, 1101–1111. DOI: 10.1002/jcc.20425.
- [23] J. Řezáč, P. Hobza, *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, 8, 141–151. DOI: 10.1021/ct200751e.
- [24] J. C. Kromann, A. S. Christensen, C. Steinmann, M. Korth, J. H. Jensen, *Peer J.* **2014**, 2, e449. DOI: 10.7717/peerj.449.
- [25] R. Fletcher, "Practical Methods of Optimization: Unconstrained Optimization", Wiley, **1980**.
- [26] J. Baker, *J. Comput. Chem.* **1986**, 7, 385–395. DOI: 10.1002/jcc.540070402.
- [27] M. P. Allen, D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press, **2017**.
- [28] S. Grimme, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, 15, 2847–2862. DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00143.
- [29] J. W. Storer, D. J. Giesen, C. J. Cramer, D. G. Truhlar, *J. Comp.-Aid. Mol. Des.* **1995**, 9, 87–110. DOI: 10.1007/BF00117280.
- [30] D. R. Armstrong, P. G. Perkins, J. J. P. Stewart, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1973**, 8, 838–840. DOI: 10.1039/DT9730000838.
- [31] W. Yang, W. J. Mortier, *J. Am. Chem. Soc.* **1986**, 108, 5708–5711. DOI: 10.1021/ja00279a008.
- [32] S. Grimme, *Chem. Eur. J.* **2012**, 18, 9955–9964. DOI: 10.1002/chem.201200497.
- [33] Licença AGPL3: gnu.org/licenses/agpl-3.0.en.html (acedido em 11/08/2022).
- [34] R. Ramakrishnan, P. O. Dral, M. Rupp, O. A. von Lilienfeld, *Sci. Data* **2014**, 1, 140022. DOI: 10.1038/sdata.2014.22.
- [35] A. S. Miranda, P. M. Marcos, J. R. Ascenso, M. N. Berberan-Santos, F. Menezes, *Molecules* **2022**, 27, 3247. DOI: 10.3390/molecules27103247.
- [36] F. Menezes, G. M. Popowicz, *ChemPhysChem* **2022**, 23, e202200395. DOI: 10.1002/cphc.202200395.
- [37] F. Menezes, G. M. Popowicz, *Molecules* **2022**, 27, 3838. DOI: 10.3390/molecules27123838.
- [38] F. Menezes, G. M. Popowicz, *Molecules* **2023**, 28, 2841. DOI: 10.3390/molecules28062841.
- [39] H. Kruse, P. Banáš, J. Šponer, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, 15, 95–115. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00643.
- [40] P. Grygier, K. Pustelny, J. Nowak, P. Golik, G. Popowicz, O. Plettenburg, G. Dubin, F. Menezes, A. Czarna, *J. Med. Chem.* **2023**, 66, 4009–4024. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.2c01887.
- [41] D. Weininger, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1988**, 28, 31–36. DOI: 10.1021/ci00057a005.

>

*Filipe Menezes

Institute of Structural Biology, Helmholtz Munich.

Filipe Menezes estudou química no Instituto Superior Técnico. Durante o seu doutoramento desenvolveu novos métodos *ab initio* para o programa MOLPRO. Após cinco anos de experiência no grupo de propriedades físicas da *Linde Engineering*, Filipe juntou-se em 2021 ao grupo

do Dr. Popowicz. De momento coordena a integração de propriedades quânticas nos algoritmos desenvolvidos no grupo. As suas áreas científicas de interesse são química computacional aplicada a problemas da mais variada natureza e inteligência artificial. filipe.menezes@helmholtz-munich.de ORCID.org/0000-0002-7630-5447

>

Grzegorz M. Popowicz

Institute of Structural Biology, Helmholtz Munich.

Grzegorz Popowicz estudou física e bioquímica com supervisão do Prof. Huber (Prémio Nobel Química, 1988). Com foco particular em interações entre proteínas e exploração de novos alvos terapêuticos, as suas atividades de investigação abrangem a biologia estrutural e a descoberta

de fármacos. Recentemente, Grzegorz Popowicz tem desenvolvido algoritmos baseados em inteligência artificial com diversas aplicações em química medicinal. Pela descoberta de novos compostos com atividade anti-parasítica, foram-lhe atribuídos diversos prémios. grzegorz.popowicz@helmholtz-munich.de ORCID.org/0000-0003-2818-7498

Na Mira da Química



A *ChemistryViews* é uma revista de notícias *online* da *Chemistry Europe*, uma organização de 16 Sociedades Europeias de Química. Esta revista publica informação diversa sobre o que está a acontecer no mundo da Química, destacando também as pessoas que estão por trás da ciência que se faz. Nas publicações encontramos diferente conteúdo, catalogado em quatro secções: Investigação, Educação/História, Indústria e Eventos. Cada secção está depois organizada em diferentes tópicos. Com um simples clique entramos no fascinante mundo da Química!

Veja mais em chemistryviews.org

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt



How Do Oxygen Masks on Airplanes Work?

ChemistryViews

$$\text{NaClO}_3 + \text{Fe} \longrightarrow \text{NaCl} + \text{FeO} + \text{O}_2 + \text{heat}$$

=> NaClO_3 melts

$$2 \text{NaClO}_3 \xrightarrow{\text{BaO}_2} 2 \text{NaCl} + 3 \text{O}_2 + \text{heat}$$

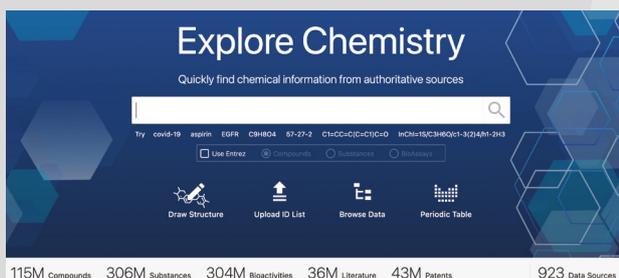
catalyst + captures Cl_2 (from undesirable side reactions)

$$\text{BaO}_2 + \frac{1}{2} \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{BaCl} + \text{O}_2$$

Como funcionam as máscaras de oxigénio nos aviões?
@ChemistryViews



Explorar a Química Online



Consulta de informação sobre compostos químicos. @PubChem

Veja mais em pubchem.ncbi.nlm.nih.gov

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

O *PubChem* é um banco de dados de Química pertencente ao *National Institutes of Health* (NIH), uma organização governamental americana, lançado em 2004. O acesso aos dados é livre, o que o torna uma ferramenta útil não só a cientistas, como também a estudantes e público em geral. Todos os meses esta plataforma fornece dados a vários milhões de utilizadores em todo o mundo. O *PubChem* contém principalmente moléculas pequenas, mas também se pode obter informação sobre macromoléculas. A informação é disponibilizada através de um sistema de busca por estrutura química, ou por identificadores (e.g., SMILES), dando acesso a propriedades químicas e físicas, atividades biológicas, patentes, segurança, dados de toxicidade e muitos outros. Os dados do *PubChem* são fornecidos por centenas de fontes, incluindo agências governamentais, fornecedores de produtos químicos e editores de publicações científicas.

O Sol e a Vitamina D

Com a chegada da primavera e do verão, os dias são maiores, há mais luz, mais sol, mais vida, mais vitamina D. A vitamina D é essencial no processo de absorção e retenção de cálcio e fósforo no nosso organismo, sendo importante para a saúde dos nossos ossos. Mas não só. Vários órgãos e tecidos têm receptores de vitamina D, o que sugere que tem outras funções importantes. A deficiência de vitamina D, um problema da nossa sociedade devido à modificação do estilo de vida, com mais sedentarismo e atividades *indoor*, e que foi agravado pela pandemia de COVID-19, está relacionada com doenças como a osteoporose, esclerose múltipla e alguns processos cancerígenos. Mas, como acontece com muitos outros compostos químicos na sua interação com outros sistemas químicos, os sistemas biológicos, “a virtude está no meio”. O excesso de vitamina D pode provocar náuseas, falta de apetite, vômitos e fraqueza, entre outros sintomas, além de quadros de desorientação e problemas de ritmo cardíaco.

A vitamina D corresponde efetivamente a cinco compostos diferentes numerados de 2 a 6 (vitaminas D₂, D₃, D₄, D₅ e D₆). Os dois compostos principais são a vitamina D₃ e a vitamina D₂, que diferem estruturalmente na cadeia lateral do anel pentagonal. Esta diferença estrutural altera a sua ligação à proteína recetora e o seu metabolismo, mas em geral a atividade biológica é comparável. A vitamina D₂ (ergocalciferol) não é sintetizada pelo nosso organismo e tem de ser adquirida através da alimentação; já a vitamina D₃ (colecalfiferol) é sintetizada por diversos animais, tal como o salmão ou a cavala, mas também é produzida pelo corpo humano quando a nossa pele é exposta à luz solar.

A vitamina D₃ é produzida na pele a partir do 7-desidrocolesterol que, por ação da radiação UVB, quebra para formar a pré-vitamina D₃ (Pré-D₃) que, por sua vez, sofre um rearranjo termicamente induzido para formar a vitamina D₃. A vitamina D₃ é transportada até o fígado onde se transforma no derivado hidroxilado 25-hidroxivitamina D, com um grupo hidroxilo na cadeia lateral, que é transportado para os rins onde é novamente transformado pela adição de um novo grupo hidroxilo no anel de ciclo-hexano, originando o metabolito ativo. A bioconversão de 25-hidroxivitamina D no metabolito di-hidroxilado é apenas regulada pelos níveis

de cálcio, fósforo, concentração do metabolito e hormona paratiroideia (PTH).

A vitamina D é essencial para a saúde, mas a quantidade que pode ser obtida através da alimentação é relativamente baixa, pelo que é fundamental deixar que o sol atinja a nossa pele para permitir que reações químicas possam ocorrer de modo que compostos químicos essenciais se formem. Apanhe sol, mas sem excessos.... “A virtude está no meio”.

Saiba mais em:

Harvard T. H. Chan, School of Public Health, *Vitamin D*: hsph.harvard.edu/nutritionsource/vitamin-d (acedido em 5/05/2023).

D. Bikle, J. S. Adams, S. Christakos, *Vitamin D: Production, Metabolism, Mechanism of Action, and Clinical Requirements*, in J. Clifford, M. D. Rosen (Eds.), “Primer on the Metabolic Bone Diseases and Disorders of Mineral Metabolism”, 8th Edition, **2013**, Ch. 29, p235-248. DOI: 10.1002/9781118453926.ch29.

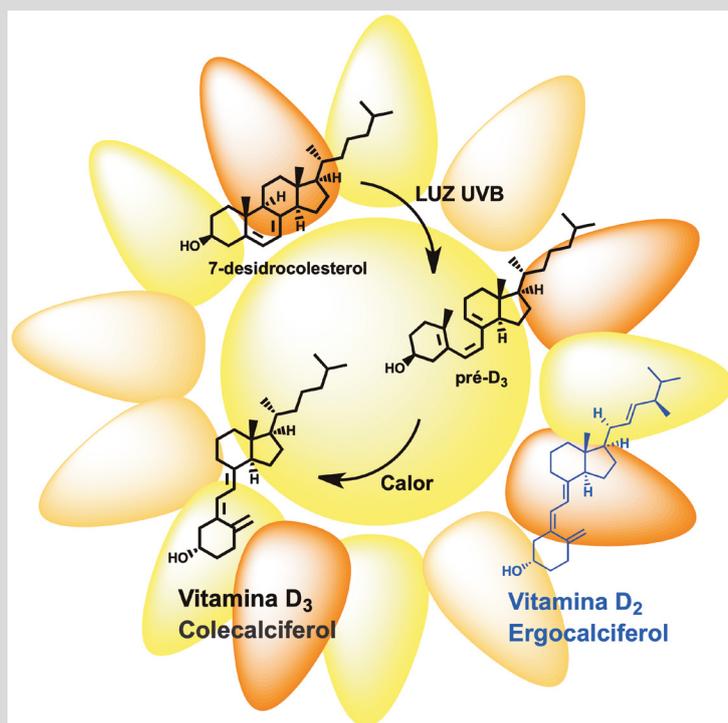
R. Nair, A. Maseeh, *J. Pharmacol. Pharmacother.* **2012**, 3, 118-126. DOI: 10.4103%2F0976-500X.95506.

S. E. Mousavi, H. Amini, P. Heydarpour, F. A. Chermahini, L. Godderis, *Environ. Int.* **2019**, 122, 67-90. DOI: 10.1016/j.envint.2018.11.052.

>

Marta Pineiro

mpineiro@qui.uc.pt



Desenhos que Flutuam

>
Marta C. Corvo

Introdução

Os desenhos que fazemos no papel são a duas dimensões. O que aconteceria se os conseguíssemos fazer flutuar?



Material

- Taça de cerâmica branca;
- Água;
- Marcadores de quadro branco;
- Medidor para líquidos;
- Pipeta (ou conta-gotas).

Procedimento

1.

Desenhar vários peixes no fundo de uma taça de porcelana (ou de vidro) com o auxílio dos marcadores. Poderá fazer desenhos totalmente preenchidos, ou simplesmente contornos. Neste último caso, passar novamente com o marcador para se certificar de que todas as linhas estão ligadas. Deixe secar durante um ou dois minutos.



2.

Encher o copo de medição com água da torneira. Transferir água cuidadosamente com o auxílio da pipeta, muito lentamente até cobrir apenas o fundo. Tenha cuidado para não deitar a água diretamente sobre os desenhos. A água vai mover-se em direção ao desenho, acabando por o envolver. Observar o que acontece.



3.

Se a água salpicar ou não funcionar na primeira tentativa, esvazie a taça, apague o desenho com uma toalha de papel, seque a taça e tente novamente.

4.

Inclinar o prato ligeiramente de um lado para o outro. O que é que acontece?



Explicação

A tinta dos marcadores dos quadros brancos foi concebida para escrever e apagar a seco. Esta tinta é fabricada com produtos químicos que fazem com que se solte facilmente das superfícies, ao contrário dos marcadores permanentes, que aderem às superfícies. Na composição das tintas que utilizámos encontram-se solventes, que são geralmente um tipo de álcool, normalmente utilizado para dissolver os pigmentos de cor que determinam a cor do marcador. Além disso, é adicionada uma resina ou polímero, que é a chave para tornar a tinta apagável. Esta resina é um polímero de silicone oleoso, que atua como um “agente de libertação”. Isto torna a tinta do marcador muito escorregadia e impede-a de aderir à superfície do quadro branco. É por isso que a tinta pode ser facilmente limpa de uma superfície não porosa muito lisa, como um quadro branco, ou vidro, ou porcelana. Nesta atividade os desenhos que fizemos soltaram-se facilmente da superfície. Mas porque flutuaram? Há duas razões. Em primeiro lugar, esta tinta não é solúvel em água, e em segundo lugar, esta tinta é menos densa do que a água, pelo que fica à superfície, flutuando. Assim, quando inclinamos a taça, os peixes movem-se na superfície da água.

Bibliografia

[1] Adaptado de R. Rothman, A. Andrus, *Good Housekeeping Amazing Science: 83 Hands-on S.T.E.A.M Experiments for Curious Kids* (Hearst Magazine Media, 2021).

> 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 CO₂, armazenamento de energia e preservação de obras de arte. marta.corvo@fct.unl.pt
ORCID.org/0000-0003-0890-6133

X Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química

O X Encontro com o tema “Ensino da Química em contextos STEAM. No trilho da inclusão, em todos os ciclos de ensino”, tem como objetivo discutir o ensino e a aprendizagem da Química integrados nas áreas STEAM (*Science, Technology, Engeneering, Art e Mathematics*), adotando abordagens que promovam a inclusão. A Comissão Organizadora apela à participação no Encontro dos professores de todos os ciclos de ensino visando a promoção de uma articulação mais robusta no que diz respeito ao ensino e à aprendizagem da Química desde os primeiros ciclos de ensino. O X Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química (XDEDQ) decorrerá na Escola Secundária Rainha Dona Leonor (Lisboa) nos dias 5 e 6 de setembro de 2023.



Mais informações disponíveis em:
xdedq.events.chemistry.pt

II Encontro Nacional da História da Química



A segunda edição do Encontro Nacional da História da Química, que terá lugar virtualmente entre 8 e 9 de setembro 2023, procura continuar o fórum criado pelo Grupo de História da Química da Sociedade Portuguesa de Química, potenciando a investigação, a comunicação e a reflexão em História da Ciência, Tecnologia e Medicina em Portugal. Deseja-se que seja uma oportunidade para perspetivar a importância atual da Química e as suas diferentes interfaces, apresentando desenvolvimentos recentes da sua historiografia, suas instituições e os diálogos concomitantes com outras áreas do saber. Pretende-se que o II Encontro Nacional da História da Química promova a discussão sobre “Múltiplas

facetas na história da ciência química”. Será uma oportunidade de divulgar trabalhos recentes da historiografia da química portuguesa, bem como congregar diversas conceções sobre a história da transversalidade da química. Ocorrendo, em 2023, o centésimo aniversário do falecimento do Professor Ferreira da Silva, cofundador e primeiro Presidente da Sociedade Portuguesa de Química, o II Encontro Nacional da História da Química não deixará de se associar a esta comemoração.

Mais informações disponíveis em:
iienhq.events.chemistry.pt

International Chemical and Biological Engineering Conference (CHEMPOR)



A Conferência Internacional de Engenharia Química e Biológica (CHEMPOR) é uma conferência trienal bem estabelecida, organizada por uma instituição de ensino superior portuguesa e pela Associação Portuguesa de Engenheiros. O objetivo é reunir especialistas das áreas de engenharia química ou biológica e assuntos relacionados para o intercâmbio de conhecimento, ciência e aplicações tecnológicas nas comunidades académica, empresarial, científica e técnica. A CHEMPOR aborda a importância geral da engenharia e tecnologia numa variedade de configurações, desde a química verde até a educação em engenharia, sempre visando o desenvolvimento sustentável e atendendo aos requisitos da sociedade.

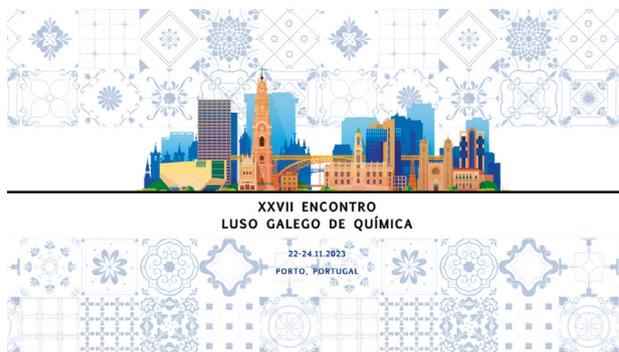
As conferências CHEMPOR promovem a participação e troca de ideias de um amplo espectro de partes

interessadas – desde académicos que trabalham em ciência e tecnologia a investigadores e engenheiros nas indústrias química, alimentar, farmacêutica e de materiais, entre outras. O objetivo é fornecer um fórum para estagiários, bolsistas e investigadores da academia e da indústria para partilhar e discutir os seus avanços. O período desafiador do passado recente levou a um atraso de dois anos. Após tão longa ausência, o CHEMPOR 2023 celebra a criatividade, a diversidade e a amizade entre os participantes, promovendo a troca de ideias e interações frutíferas. Esta edição terá lugar em Bragança entre 12 e 15 de setembro de 2023.

Mais informações disponíveis em:
chempor2023.events.chemistry.pt

XXVII Encontro Luso-Galego de Química

Mantendo vivo o evento iniciado em 1985, decorrente da estreita relação existente entre a Delegação do Porto da Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) e o Colegio Oficial de Químicos de Galicia (COLQUIGA), temos o prazer de receber o XXVII Encontro Luso-Galego de Química, que irá decorrer entre os dias 22 e 24 de novembro de 2023 na Fundação Dr. António Cupertino de Miranda. Os Encontros Luso-Galegos de Química, realizados alternadamente em Portugal e em Espanha, têm por objetivo o intercâmbio científico e tecnológico entre Portugal e a Galiza, constituem uma oportunidade única para a troca de ideias inovadoras entre investigadores e profissionais dos meios académico e industrial, a trabalhar em química e engenharia química, com o objetivo de estimular a criação de novas colaborações em áreas de interesse comum.



Mais informações disponíveis em:
xxviiigq.events.chemistry.pt

Agenda

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

> agosto de 2023

13 - 17 de agosto de 2023, São Francisco, EUA
ACS Fall 2023 National Meeting & Exposition
acs.org/content/acs/en/meetings/acs-meetings/about/future-meetings.html

18 - 25 de agosto de 2023, Haia, Países Baixos
49th IUPAC World Chemistry Congress & 52nd IUPAC General Assembly & 11th CHAINS (IUPAC 2023)
iupac2023.org

20 - 24 de agosto de 2023, Innsbruck, Áustria
21st International Conference on Near Infrared Spectroscopy (NIR 2023)
nir2023.at

21 - 23 de agosto de 2023, Roma, Itália
World Conference on Food Science & Technology
foodweek.thepeopleevents.com

24 - 25 de agosto de 2023, Berna, Suíça
SCS Fall Meeting 2023
scg.ch/component/eventbooking/fm23

27 - 31 de agosto de 2023, Thessaloniki, Grécia
EuChemS CompChem 2023
euchems-compchem.eu

27 - 31 de agosto de 2023, Genebra, Suíça
Euroanalysis 2023
euroanalysis2023.ch

27 de agosto - 01 de setembro, Praga, República Checa
15th European Congress on Catalysis (EuropaCat)
europacat2023.cz

setembro de 2023

03 - 06 de setembro de 2023, Leipzig, Alemanha
GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2023 (WiFo 2023)
chemistryviews.org/details/event/11316941/GDCh-Wissenschaftsforum_Chemie_2023_WiFo_2023.html

03 - 07 de setembro de 2023, Zagreb, Croácia
9th EFMC International Symposium on Advances in Synthetic and Medicinal Chemistry (EFMC-ASMC 2023)
efmc-asmc.org

04 - 07 de setembro de 2023, Bratislava, Eslováquia
15th Polymer Meeting
pm15.sav.sk

04 - 08 de setembro de 2023, Orléans, França
NanoPol 2023
nanopol2023.sciencesconf.org

04 - 08 de setembro de 2023, Alcalá de Henares, Espanha
25th Conference on Organometallic Chemistry (EuCOMC XXV)
congresosalcala.fgua.es/eucomc2023

05 - 06 de setembro de 2023, Lisboa, Portugal
X Encontro de Ensino e Divulgação da Química
xededq.events.chemistry.pt

05 - 08 de setembro de 2023, Évora, Portugal
International Symposium on Synthesis and Catalysis 2023 (ISySyCat2023)
isysycat2023.events.chemistry.pt

05 - 08 de setembro de 2023, Plymouth, Reino Unido
16th International Conference on the Environmental Effects of Nanoparticles and Nanomaterials (nano 2023)
plymouth.ac.uk/whats-on/iceenn-2023

06 - 07 de setembro de 2023, Roma, Itália
11th International Conference on Sustainable Development
ecsdev.org/conference/11th-icsd-2023

08 - 09 de setembro de 2023, *virtual*
II Encontro Nacional da História da Química
iienhq.events.chemistry.pt

11 - 15 de setembro de 2023, Estrasburgo, França
8th International Conference on Semiconductor Photochemistry
sp8.unistra.fr/index.php

12 - 15 de setembro de 2023, Bragança, Portugal
International Chemical and Biological Engineering Conference - ChemPor 2023
chempor2023.events.chemistry.pt

17 - 21 de setembro de 2023, Berlim, Alemanha
14th European Congress of Chemical Engineering e 7th European Congress of Applied Biotechnology
chemistryviews.org/details/event/11319574/ECCEECAB_2023_-_14th_European_Congress_of_Chemical_Engineering_and_7th_European_.html

18 - 21 de setembro de 2023, Konstanz, Alemanha
44th FGMR Annual Discussion Meeting 2023
uni-konstanz.de/fgmr-annual-discussion-meeting-2023

20 - 22 de setembro de 2023, Vila Real, Portugal
I International Meeting Molecules4Life
molecules4life-2023.events.chemistry.pt

25 - 29 de setembro de 2023, Praga, República Checa
Flatlands beyond Graphene 2023
flatlands2023.com

25 - 29 de setembro de 2023, Bento Gonçalves, Brasil
22nd Brazilian Congress on Catalysis
sbcacat.org.br/22cbcat/index.php/en

27 de setembro - 01 de outubro de 2023, Praga, República Checa
15th European Congress on Catalysis (EuropaCat 2023)
europacat2023.cz

outubro de 2023

09 - 11 de outubro de 2023, Antuérpia, Bélgica
The World Mycotoxin Forum® (14th Conference)
worldmycotoxinforum.org

11 - 13 de outubro de 2023, Bucareste, Romênia
International Symposium "Priorities of Chemistry for a Sustainable Development" (PRIOCHEM)
icechim.ro/en/institute/scientific-events/priochem-en

15 - 19 de outubro de 2023, Nápoles, Itália
31st International Symposium on the Chemistry of Natural Products e 11th International Congress on Biodiversity (ISCP31 & IC0B11)
iscnp31-icob11.org

16 - 18 de outubro de 2023, Florença, Itália
AMYC-BIOMED (Autumn Meeting for Young Chemists in Biomedical Science)
cerm.unifi.it/amyebiomed2023

17 - 19 de outubro de 2023, Ruedesheim, Alemanha
Beilstein Nanotechnology Symposium - Nanocrystal Surfaces and Defects
beilstein-institut.de/en/symposia/nanocrystals

23 - 27 de outubro de 2023, Viena, Áustria
ChemCon Europe 2023
chemcon.net/upcoming.shtml

novembro de 2023

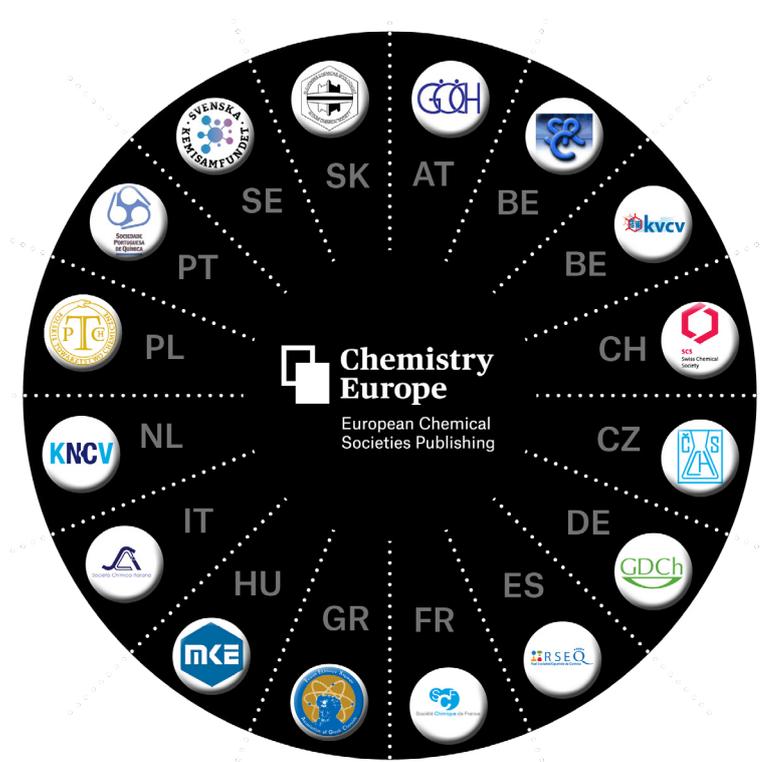
07 - 09 de novembro de 2023, Limburg, Alemanha
Beilstein Organic Chemistry Symposium - π -Conjugated Molecules and Materials
beilstein-institut.de/en/symposia/pisystems

16 - 18 de novembro de 2023, Basileia, Suíça
EFMC International Symposium on Chemical Biology (EFMC-ISCB 2023)
efmc-iscb.org

22 - 24 de novembro de 2023, Lisboa, Portugal
13th International Vanadium Symposium
vanadium13.events.chemistry.pt

22 - 24 de novembro de 2023, Porto, Portugal
XXVII Encontro Luso-Galego de Química
xxviiigq.events.chemistry.pt

27 - 28 de novembro de 2023, Basileia, Suíça
Automated Synthesis Forum 2023
automatedsynthesisforum.com



Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

Química

www.spq.pt

abril - junho
Vol. 47 | N.º 169 | 2023



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA