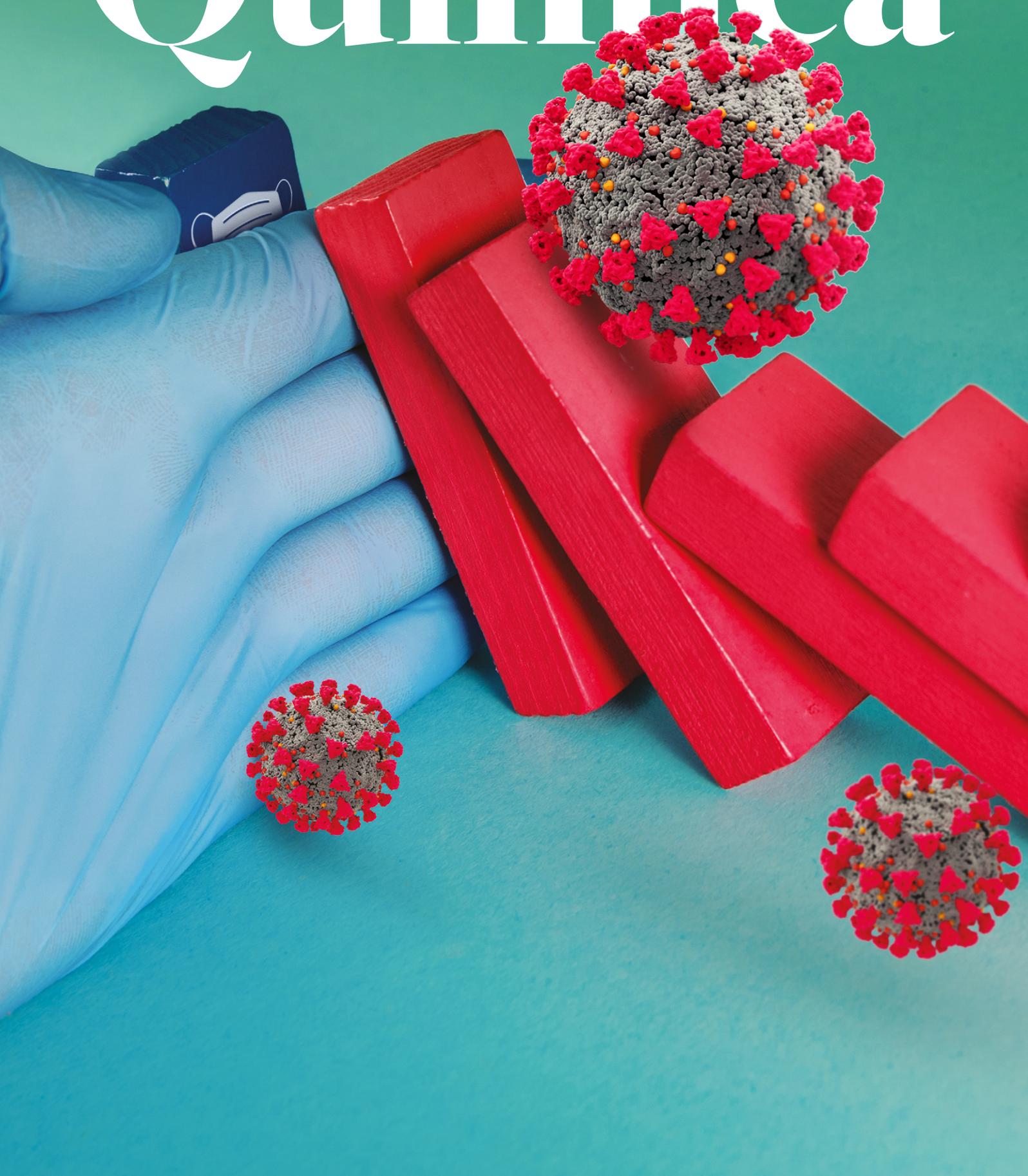


Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

5,00 € - Distribuição
gratuita aos sócios da SPQ

janeiro - março
Vol. 44 | N.º 156 | 2020

Química





Editorial | 02

Secretário-Geral | 03

Notícias

05

Atualidades Científicas

12

Artigos

19

Cinética Química e Dinâmica
Epidemiológica | 19

O *Sabão* na Luta Contra o SARS-CoV-2: uma
Questão de Forças Intermoleculares | 32

Plástico na Era do Coronavírus: de Herói a
Vilão, de Vilão a Coroado | 35

Micro-ondas: Nova Abordagem na Síntese
de Redes-Metalo-Orgânicas | 40

Cascas de Frutos Secos como Biossor-
ventes: uma Revisão Bibliográfica | 47

Stephanie Louise Kwolek - Kevlar, a Fibrã
à Prova de Bala | 53

Ensino

60

Doseamento do Açúcar em Bebidas Refrige-
rantes. Simples, Seguro e Sustentável! | 60

Aplicações de Jogos que Podem Ser Usados
Como Recursos Educativos no Ensino da
Química Orgânica | 68

Espaço dos Mais Novos | 71

Destaques | 74

Agenda | 75



Achatar a curva (epidemiológica). Álcool gel. Boletim epidemiológico da Direção Geral de Saúde (DGS). Cadeia de contágio. Casos confirmados/recuperados/suspeitos. Cerca sanitária. Confinamento. Coronavírus. COVID-19. Cuidados intensivos. Desconfinamento. Dexametasona. Distanciamento social. Dois metros. Ensino à distância. Escolas fechadas. Espaços públicos. EPI (luvas, máscaras, viseiras,...). Epidemia. Estado de alerta/contingência/calamidade/emergência. Etiqueta respiratória. Fase de contenção/mitigação/supressão. Fique em casa. Gotículas. Grupos de risco. Hidroxicloroquina. Higiene das mãos/superfícies. Imunidade comunitária/de grupo. Isolamento profilático (quarentena). Óbitos.

Organização Mundial de Saúde (OMS). Pandemia. Plano de contingência. Portador assintomático. Quartos de pressão negativa. Remdesivir. SARS-CoV-2. Sintomas (febre, tosse, dificuldade respiratória,...). Taxa (de letalidade, de transmissão, R_0 , R_t). Teletrabalho. Testes serológicos. Transmissão comunitária. Vacina. Ventilador. Vigilância ativa e passiva. Wuhan. Zaragatoa.

A história do tempo que vivemos não pode ser escrita sem muitos dos termos anteriores. São palavras e expressões ditas e escritas nos últimos meses e que servem como prova do tempo que passa. Faltarão outras que o tempo se encarregará por (re)escrever. Há, pelo menos uma, que deveria ter maior visibilidade nestes tempos. Passeia-se entre nós, toca-nos, por vezes não a sentimos, mas está omnipresente: Química. Quase não se dá por ela, mas participa na chamada linha da frente do combate à COVID-19. Materiais dos EPI, instrumentação médica, produtos de lavagem e desinfecção das mãos e superfícies, ou como pilar na busca de tratamento e vacinas (pede-se magia na *retorta de alquimista*...). Também está presente nos momentos emotivos, tão férteis neste tempo de pandemia, em que uma série de neurotransmissores cumprem o seu papel. Temos o desassossego do confinamento, os humores dos profissionais de muitas áreas que arduamente contribuem para ultrapassar este período, *a dor que desatina sem doer*, a alegria de quem vence a doença, o pesar por aqueles que partem...

Dado o papel da química no contexto da COVID-19, o QUÍMICA não poderia deixar de abordar o tema neste número. Nesta pequena viagem poderá constatar que existem muitos pontos de contacto entre a cinética química e a dinâmica epidemiológica. Reconhecerá também o papel dos agentes desinfetantes, nomeadamente *sabões* e produtos à base de álcool, e a *plasticidade* dos polímeros na luta contra o SARS-CoV-2. Mas *o mundo pula e avança* e nem tudo tem de ser COVID-19. Espaço ainda para a importância das micro-ondas em síntese química, aqui na perspectiva dos MOFs, a utilização de biossorbentes para a remoção de elementos potencialmente tóxicos em águas residuais contaminadas e a homenagem à química no feminino, na figura de uma mulher de fibra, Stephanie Louise Kwolek. Uma chamada de atenção também para os sentimentos xenófobos, sexistas, racistas e outras discriminações que, infelizmente, fazem parte do nosso quotidiano. Neste contexto, fique a par da decisão da SPQ de subscrever o manifesto de inclusão e diversidade da *Royal Society of Chemistry*. Apetece revisitar aqui a "Lágrima de Preta" de António Gedeão...

Um apontamento final neste que é o primeiro número do QUÍMICA de 2020. O virar de um ano significa, por vezes, um recomeço. Recomeçar. Uma palavra que poderia também figurar no primeiro parágrafo deste editorial. *Recomeça...* / *Se puderes* / *Sem angústia* / *E sem pressa*. / *E os passos que deres*, / *Nesse caminho duro* / *Do futuro* / *Dá-os em liberdade*. / *Enquanto não alcances* / *Não descanses*. / *De nenhum fruto queiras só metade...* (excerto de "Sísifo", Miguel Torga).

>

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 156, janeiro-março 2020

REDAÇÃO E ADMINISTRAÇÃO

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

Tel.: 217 934 637 - Fax: 217 952 349

bspq@uevora.pt • www.spq.pt

Diretor: Paulo Mendes

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

Comissão de Aconselhamento Editorial:

Augusto Tomé, Helder T. Gomes, João Paulo R. F. André, Joaquim L. Faria, Jorge Morgado, Mário N. Berberan-Santos

ESTATUTO EDITORIAL

Disponível em:

www.spq.pt/boletim/estatuto_editorial

PUBLICIDADE

Sociedade Portuguesa de Química

secretariado@spq.pt

DESIGN GRÁFICO E PAGINAÇÃO

Rodrigo Nina

www.rodrigonina.com

rodrigo.pnina@gmail.com

Tel.: 964 819 822

IMPRESSÃO E ACABAMENTO

Tipografia Lessa

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

4470-343 Maia

+351 229 441 603

geral@tipografialessa.pt

Tiragem: 1.500 exemplares

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

PUBLICAÇÃO SUBSIDIADA PELA

FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia

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

Inclusão e Diversidade na SPQ por Adelino Galvão

No passado dia 4 de junho o Jornal *Angewandte Chemie* publicou um artigo contendo, nas próprias palavras do editor da revista, "...língua ofensiva e difamatória dirigida a grupos de diferentes géneros, raças e nacionalidades...". No seguimento do turbilhão de críticas que rapidamente inundaram as redes sociais, o jornal retraiu o artigo e emitiu um comunicado que pode ser lido na íntegra no seu *site* (onlinelibrary.wiley.com/journal/15213773#statement). A decisão original dos editores, e dos revisores que a apadrinharam, de publicar o artigo, dando expressão aos alegados sentimentos xenófobos e racistas do professor Tomas Hudlicky, pode ser justificada com base no direito à liberdade de expressão. No entanto, neste caso, o artigo deveria ser precedido de uma caixa com uma explícita declaração de repúdio e manifesta incompatibilidade com a linha editorial da revista. Essa declaração foi publicada a posteriori (ver link acima).

No caso português, e citando Bacelar de Vasconcelos, "a liberdade de expressão não é um direito absoluto, estando limitada por outros valores e princípios constitucionais..." A violação grave destes princípios é inclusivamente punida pelo Código Penal em vigor: - "Quem, publicamente, por qualquer meio destinado a divulgação, nomeadamente através da apologia, negação ou banalização grosseira de crime de genocídio, guerra ou contra a paz e a humanidade; (...) b) Difamar ou injuriar pessoa ou grupo de pessoas por causa da sua raça, cor, origem étnica ou nacional, ascendência, religião, (...) é punido com pena de prisão de 6 meses a 5 anos". (Art.º 240, n.º 2, alínea b) do Código Penal). E a Lei de Imprensa determina que o "diretor, o diretor-adjunto, o subdiretor ou quem concretamente os substitua, (...) que não se oponha, através da ação adequada, à comissão de crime através da imprensa, podendo fazê-lo, é punido com as penas cominadas nos correspondentes tipos legais, reduzidas de um terço nos seus limites". (Art.º 31, n.º 3)." (*in JN 11/7/2019*).

A Sociedade Portuguesa de Química almeja a que, enquanto sociedade, atinjamos o direito à *indiferença* erradicando a discriminação e a desigualdade. No entan-

to, estamos conscientes de estar longe dessa utopia e, no presente, é necessário garantir o direito à diferença e à diversidade que tanto nos enriquece enquanto sociedade. Assim sendo, a Sociedade Portuguesa de Química decidiu subscrever o manifesto de inclusão e diversidade da *Royal Society of Chemistry* (rsc.org/news-events/articles/2020/jun/id-joint-societies-statement) e comprometer-se, nomeadamente em relação à sua publicação QUÍMICA com os seguintes princípios:

- Reunir um grupo diversificado de consultores externos para avaliar os nossos procedimentos atuais e auxiliar na criação de novos que visem eliminar o potencial de discriminação e promover a diversidade em todos os níveis;
- Ser transparente em relação aos resultados das avaliações efetuadas (internas ou externas), nomeadamente na publicação QUÍMICA e nos procedimentos concursais;
- Empenhar-se em criar mais diversidade nos conselhos editorial e consultivo do QUÍMICA, assim como nas Comissões Organizadoras de eventos;
- Desenvolver novas diretrizes gerais incorporando princípios e práticas de DE&I (Diversidade, Equidade e Inclusão);
- Promover fóruns de diálogos externos sobre questões de DE&I, em parceria com outras associações e organismos.

O combate à xenofobia, ao racismo e outros males similares deve fazer-se em primeira instância através de uma educação inclusiva, diversa e aberta que promova uma cultura democrática e, no plano científico, uma visão humanista da ciência. A SPQ tem pugnado, nomeadamente nas suas intervenções, na definição do Perfil do Aluno (PAFC), para que isso aconteça. Mas não é suficiente. É necessário que sejamos proativos e intolerantes em relação a qualquer retrocesso civilizacional que nos afaste desse caminho e não compactuar, por mais eminentes que sejam os intervenientes, com atitudes que contrariem o caminho que estamos a percorrer.



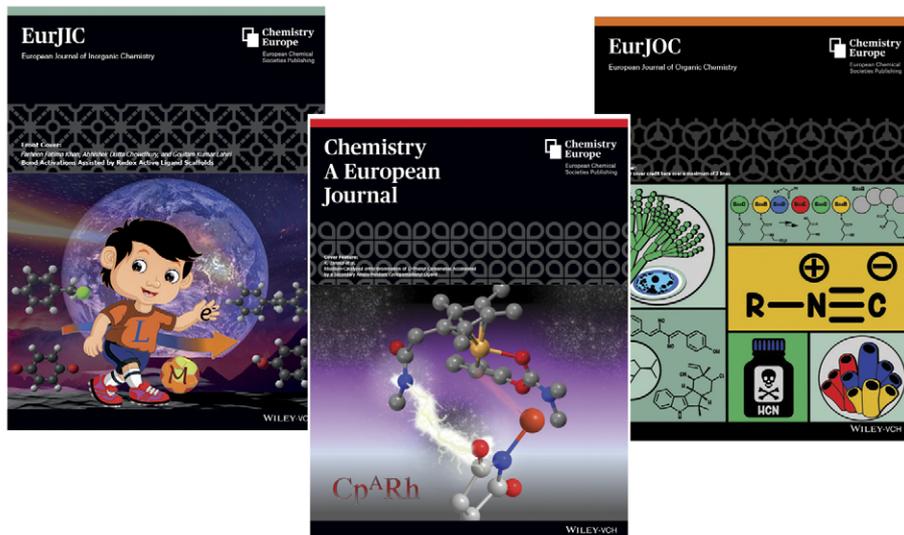
>

Adelino Galvão

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

Change is here

ChemPubSoc Europe has transformed into Chemistry Europe.



Our mission is

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

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

Chemistry Europe

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

www.chemistry-europe.org

Batteries & Supercaps

ChemBioChem

ChemCatChem

ChemElectroChem

ChemistryOpen

Chemistry-Methods

ChemistrySelect

ChemMedChem

ChemPhotoChem

ChemPhysChem

ChemPlusChem

ChemSusChem

ChemSystemsChem



**Chemistry
Europe**

European Chemical
Societies Publishing

published in partnership with

WILEY-VCH



13.º Encontro Nacional de Química Orgânica (13 ENQO) e 6.º Encontro Nacional de Química Terapêutica (6 ENQT)

O 13.º Encontro Nacional de Química Orgânica (13 ENQO) e 6.º Encontro Nacional de Química Terapêutica (6 ENQT) decorreu entre 15 e 17 de janeiro de 2020 na Universidade de Aveiro. A organização deste encontro científico esteve a cargo das Divisões de Química Orgânica e de Química Terapêutica da SPQ.

A cerimónia de abertura contou com a presença do professor Paulo Jorge Ferreira, reitor da Universidade de Aveiro, do professor Artur Silva, na qualidade de presidente da SPQ, do professor Armando Silvestre, diretor do Departamento de Química da Universidade de Aveiro, e dos professores Augusto Tomé e Matilde Marques, presidentes das Divisões de Química Orgânica e Química Terapêutica, respetivamente.

O programa científico foi verdadeiramente interdisciplinar, tendo contado com a contribuição de excelentes oradores nacionais e internacionais. As conferências plenárias foram proferidas por Tomás Torres (Univ. Autónoma de Madrid, Espanha), Amélia Rauter (Univ. Lisboa), Christa Müller (Univ. Bonn, Alemanha), Fernanda Proença (Univ. Minho), Véronique Gouverneur (Univ. Oxford, Reino Unido) e Herman Overkleeft (Univ. Leiden, Holanda). Foram também apresentadas por cientistas portugueses sete comunicações *keynote* e seis comunicações orais convidadas. De entre os trabalhos submetidos, foram ainda selecionadas 31 comunicações para apresentação oral e cerca de 120 comunicações em painel.

Todas as sessões científicas foram muito participadas, tendo o Encontro propiciado amplas oportunidades de profícua discussão científica, quer no decurso dos períodos dedicados às apresentações orais quer durante as apresentações dos *posters*. O congresso reuniu cerca de 170 participantes, desde especialistas com carreiras estabelecidas nas áreas de Química Orgânica e Química Medicinal a muitos jovens estudantes e investigadores em pós-doutoramento, cuja presença

atenta e entusiasta demonstrou amplamente o vigor e dinamismo de ambas as áreas no país.

Tal como vem sendo habitual, o Encontro incluiu uma cerimónia de atribuição de Prémios de Mérito das Divisões de Química Orgânica e de Química Terapêutica, que visam promover e distinguir a excelência em Química Orgânica e Química Medicinal desenvolvidas por jovens investigadores em instituições nacionais. O Prémio para Melhor Químico Orgânico Jovem foi atribuído ao doutor Nuno Moura, da Universidade de Aveiro. Foram também distinguidas as melhores teses de doutoramento e de mestrado em Química Orgânica e em Química Medicinal. No final do Encontro foram ainda atribuídos prémios para as melhores comunicações orais e em painel apresentadas por jovens químicos nas áreas de Química Orgânica e Química Medicinal.

O Encontro contou com o patrocínio institucional da Universidade de Aveiro e da SPQ. Registam-se também com agrado os patrocínios das revistas *Journal of Medicinal Chemistry* e *Pharmaceuticals* e da *ChemPubSoc Europe*. Agradamos ainda salientando o apoio da

empresa farmacêutica BIAL, bem como das empresas Enzymatic, José Manuel Gomes dos Santos, LaborSpirit, MTBrandão, Qlabo, ScanSci e VWR.

Durante o Encontro teve lugar uma reunião conjunta das Divisões de Química Orgânica (DQO) e Química Terapêutica (DQT), no decurso da qual foram eleitas as professoras Paula Branco (FCT-UNL) e Emília Sousa (FF-UPorto) como presidentes da DQO e DQT, respetivamente, para o próximo biénio. Na sessão de encerramento foi anunciado que o 14.º Encontro Nacional de Química Orgânica (14 ENQO)/7.º Encontro Nacional de Química Terapêutica (7 ENQT) decorrerá em Lisboa em 2022.

Mais informações sobre o Encontro podem ser consultadas em 13enqo-6enqt.eventos.chemistry.pt.

>

Augusto Tomé

actome@ua.pt

Matilde Marques

matilde.marques@tecnico.ulisboa.pt



Sessão de abertura do 13 ENQO/6 ENQT. Da esquerda para a direita: Prof. Armando Silvestre (diretor do Departamento de Química), Prof. Artur Silva (presidente da SPQ), Prof. Paulo Jorge Ferreira (reitor da Universidade de Aveiro), Prof. Augusto Tomé (presidente da Divisão de Química Orgânica) e Prof.ª Matilde Marques (presidente da Divisão de Química Terapêutica).

Créditos da fotografia:

José M. G. Pereira; @josemgpereira

Centro de Formação de Professores – SPQ

O interesse e a motivação dos jovens para o estudo e conhecimento da Química dependem fortemente da forma como os assuntos lhes são apresentados pelos professores. Por isso, a atualização científica dos professores de química, a par da sua atualização em novas estratégias de ensino é, não só importante, como necessária.

Atenta às reais necessidades de formação dos professores de química, a SPQ, enquanto sociedade científica com a missão: ... *promover, cultivar e desenvolver, em Portugal, a investigação, o ensino e a aplicação da Química...* (Estatutos, Art.º n.º 2), criou em 2018 um Centro de Formação de Professores que se encontra acreditado pelo Conselho Científico-Pedagógico da Formação Contínua (CCPFC/DC1177/18).

Desde então foram acreditadas as Ações de formação: *A Tabela Periódica: um Ícone na Centralidade da Química* (CCPFC/ACC-101645/18), *Nomenclatura química: adequação das regras da IUPAC à língua portuguesa* (CCPFC/ACC-102892/19) e *Conhecer a Luz para uma Cidadania Ativa* (CCPFC/ACC-104322/19), cada uma com a duração de 25 h, a que corresponde um crédito. No total, realizaram-se até à data 10 Ações presenciais e 3 à distância, por videoconferência. Além destas ações, e aproveitando a circunstância da realização dos Encontros de Divisão de Ensino e Divulgação da

Química, promoveram-se Ações correspondentes a 0,5 créditos aquando da realização do VII Encontro da Divisão de Ensino e Divulgação da Química – VII EDEDQ (2018) e do Encontro de Ensino e Divulgação da Química (2019).

Tendo em conta as circunstâncias de pandemia em que vivemos, iremos promover, no primeiro trimestre de 2020–2021, várias Ações de Formação à distância, via videoconferência, ao abrigo da Carta Circular 3/2020 de junho de 2020 da CCPFC. Mantenha-se a par das Ações promovidas em formacao.spq.pt.

No sentido de continuar a promover a atualização científica dos professores de química, a SPQ procurará ampliar e continuar a promover Ações de formação que contribuam para a valorização e motivação dos professores de química. Para tal, a SPQ conta com o apoio e disponibilidade dos seus sócios.

Para além dos conhecimentos, disponibilidade e sentido de missão dos seus formadores (vide formacao.spq.pt), o Centro de Formação da SPQ pode dispor durante o ano letivo de 2019–2020 do apoio da professora Tânia Coelho (destacada), o que muito contribui para o sucesso das ações levadas a cabo. Hoje e sempre conta com o apoio do Leonardo Mendes para criar e manter o site e com o apoio da Cristina Campos para os aspetos administrativos.



>

Professora Maria Fernanda Carvalho

A Coordenadora do
Centro de Formação da SPQ

EuChemS Comemora o seu 50.º Aniversário

A *European Chemical Society* como a conhecemos agora, anteriormente Associação Europeia de Ciências Moleculares e Químicas (EuChemS), teve origem em Praga no dia 3 de julho de 1970 como Federação das Sociedades Europeias de Química (FECS), numa

reunião inaugural em que participaram 17 Sociedades Químicas Europeias.

A ideia de constituir uma organização guarda-chuva começou alguns anos antes, envolvendo principalmente representantes de sociedades químicas da Europa Ocidental, estendendo-se em seguida a países da Europa Oriental. Foi estabelecido um “Comité Diretivo”, que se reunia alternadamente em cidades da Europa Oriental e Ocidental, e os seus membros dedicavam-se a promover uma cooperação internacional e a construir a imagem da Química Europeia,

que ainda hoje faz parte da missão da EuChemS. A 14 de outubro de 2004, em Assembleia Geral realizada em Bucareste, a FECS adotou a designação EuChemS, decidiu estabelecer a sua sede na Bélgica, e preparou uma nova constituição que foi assinada por 29 Sociedades Químicas.

Agora, em 2020, a EuChemS engloba 51 Sociedades e Organizações Químicas de 33 países, representando cerca de 150 000 químicos. Tornou-se o que as organizações fundadoras imaginaram em 1970.

A celebração do 50.º aniversário da EuChemS teve lugar *online* no dia 3 de julho.

Mais informações disponíveis em euchems.eu.



>
Bruno Machado
brunofm@fe.up.pt

EuChemS Comemorou o Dia Internacional das Mulheres e Raparigas na Ciência

No dia 11 de fevereiro de 2020, decorreu o 5.º Dia Internacional das Mulheres e Raparigas na Ciência e a EuChemS participou ativamente na celebração através das suas redes sociais.

O Dia Internacional das Mulheres e Raparigas na Ciência foi implementado pela UNESCO e pela ONU-Mulheres em 2015. É um dia para celebrar as mulheres nas ciências, promovendo a sua participação plena e igualitária, bem como incentivar raparigas a optar por carreiras em Ciência, Tecnologia, Engenharia e Matemática.

Neste dia, Mariya Gabriel, Comissária para a Inovação, Investigação, Cultura, Educação e Juventude, lançou a 7.ª edição do Prémio da UE para Mulheres Inovadoras 2020. Este prémio tem como objetivo celebrar o trabalho das mulheres em investigação e desenvolvimento e inspirar as gerações futuras.

No dia 12 de fevereiro, Pilar Goya, presidente da EuChemS, participou no *Global Women's Breakfast* em Murcia, Espanha. Este evento de *networking* global foi promovido pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC) para valorizar a participação das mulheres na Química. Este ano, o *Global Breakfast* decorreu em mais de 240 locais em todo o mundo.

>
Bruno Machado
brunofm@fe.up.pt



Medalha de Ouro Europeia em Química 2020 Atribuída ao Prof. Michele Parrinello



em Química Teórica (2001) e *Dreyfus Prize* em *Chemical Sciences* (2017). Já este ano, o Professor Parrinello recebeu a Medalha Benjamin Franklin (Franklin Institute) em Química. Adicionalmente, o Professor Parrinello é autor em mais de 600 publicações e membro de várias academias, incluindo a *British Royal Society* e a *Accademia Nazionale dei Lincei*.

Os seus interesses em Ciência são interdisciplinares. Juntamente com o Professor Car, ele encontra-se ainda a desenvolver e aplicar o método de dinâmica molecular Car-Parrinello. Este software de Química computacional analisa o movimento de átomos individuais. Este método tem encontrado amplas aplicações em física e química e permite que os cientistas entendam o comportamento atómico nas mais diversas aplicações.

A Medalha de Ouro Europeia em Química de 2020 foi atribuída ao Professor Michele Parrinello por realizações excepcionais no campo da química na Europa. O Professor Parrinello será presenteado com a Medalha de Ouro durante o 8.º Congresso de Química EuChemS em Lisboa, Portugal, entretanto adiado para 2022, onde deverá realizar a palestra plenária de abertura do evento.

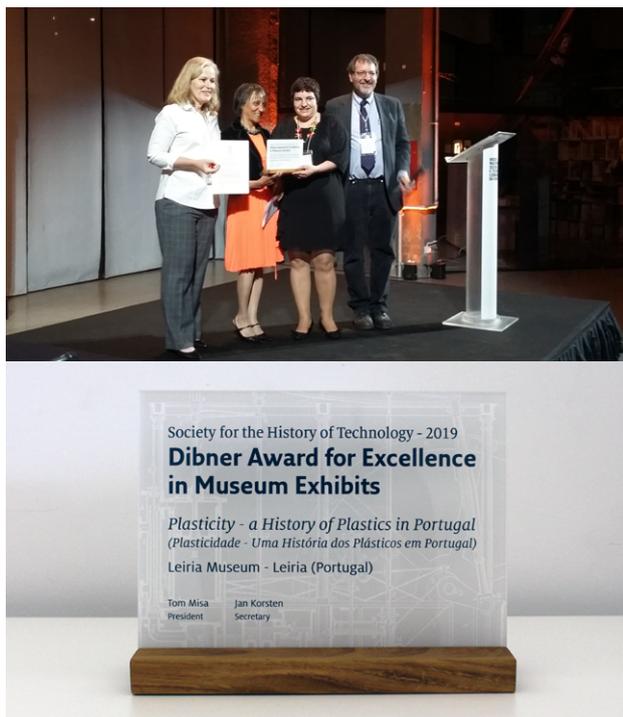
O professor Parrinello é um físico Italiano. Atualmente, é professor na ETH de Zurique e na Università della Svizzera Italiana Lugano, na Suíça. Recebeu inúmeros prémios devido à qualidade da sua investigação. Entre eles, encontram-se o *American Chemical Society Award*

>
Bruno Machado
 brunofm@fe.up.pt

International Dibner Award 2019 para a Exposição “Plasticidade – Uma História dos Plásticos em Portugal”

A exposição “Plasticidade – Uma História dos Plásticos em Portugal”, recebeu em outubro de 2019, o *International Dibner Award for Excellence in Museum Exhibits*, galardão que tem por objetivo destacar a qualidade e a excelência de exposições patentes em museus, que apostem na interpretação

e difusão da história da tecnologia, indústria e da engenharia. Parâmetros como o *design*, as narrativas, os objetos apresentados, bem como a pertinência dos assuntos divulgados são aspetos valorizados na atribuição deste prémio atribuído pela *Society for the History of Technology* (SHOT).



Receção do Dibner Award, Milão, outubro 2019. Crédito a Erik van der Vleuten.

Esta exposição, inaugurada a 6 de abril de 2019, resulta de uma parceria entre o Museu de Leiria e o projeto de investigação “O Triunfo da Baquelite: Contributos para uma História dos Plásticos em Portugal”, desenvolvido no Centro Interuniversitário de História das Ciências e da Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa, e coordenado por Maria Elvira Callapez, com financiamento da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT).

No âmbito deste projeto dedicado ao sector da indústria de plásticos em Portugal foi possível reunir, num curto intervalo de tempo, uma coleção de objetos muito diversificada, oriundos de museus, investigadores, colecionadores particulares, mas também de várias empresas nacionais, com particular incidência para as empresas da região de Leiria e Marinha Grande. O levantamento de objetos contou com uma campanha de angariação junto do público, tendo-se recolhido e selecionado várias centenas deles, segundo categorias, técnicas e períodos de fabrico, permitindo traçar uma cronologia dos principais marcos do desenvolvimento do sector em Portugal.

Esta coleção de plásticos incorpora histórias, tecnologias, processos, novos comportamentos e quotidianos. Especificamente, resgata todas essas vertentes para o interior da narrativa expositiva, possuindo exemplares de diversas proveniências, formatos, matérias plásticas e, cronologicamente, apresenta objetos que remontam aos anos de 1930,

quando da abertura das primeiras unidades fabris em Leiria dedicadas ao fabrico de plásticos em Portugal, passando pelos anos de 1950 a 1980, onde se desenvolveram várias unidades fabris na região de Leiria, Marinha Grande, Porto, Lisboa, Guimarães..., até à atualidade, com a produção de novos plásticos e outros sintéticos, como fibras.

Selecionar, apresentar e destacar os objetos e desenvolver uma narrativa foi o desafio do projeto museográfico, que assentou num design que funciona como elemento mediador entre o espaço e os suportes expositivos, e onde a cor e a forma são elementos de destaque da “graça” que se desenvolve ao longo dos módulos expositivos. A representação gráfica é ela mesmo um fio condutor coerente e estrutural da exposição, presente tanto no anúncio da exposição, como nos marcadores temporais dos diferentes módulos, relacionando-se de forma direta com a cor e as formas dos objetos apresentados e, sobretudo, realçando a sua plasticidade individual ao longo dos conteúdos temáticos selecionados. O desenvolvimento dos módulos expositivos aposta ainda numa diversidade funcional e tipológica dos diferentes contextos sociais do objeto plástico, desde o doméstico ao industrial, ou do religioso ao infantil. A diversidade é, aliás, um ponto forte desta exposição que está associada com as tipologias de plásticos (os diferentes polímeros) e suas características químicas e físicas.

A exposição culmina com um último módulo intitulado “Arte Plástica” onde são apresentadas, entre outras, obras de arte em plástico de Nuno Sousa Vieira e outras de carácter rotativo, oriundas da coleção da Fundação Calouste Gulbenkian. Deste modo, associa-se a expressão artística com a narrativa histórica, movendo o olhar do visitante para as capacidades “plásticas” do plástico, explorando a sua plasticidade, característica que abriu o universo criativo a novas formas e composições.

A exposição conta ainda com vídeos que apresentam três aspetos diferentes em torno do uso e fabrico do plástico, nomeadamente o vídeo *Le Chant de Syrene*, realizado por Alain Resnais, um vídeo com relatos de antigos técnicos e operários da indústria na região de Leiria, fruto de um vasto trabalho de recolha de depoimentos desenvolvido sob a coordenação de Paula Mota Santos e a Associação “ACOA: Amigos do Parque e do Museu do Côa”, e um conjunto de pequenos vídeos produzidos no âmbito de projetos de educação ambiental (alertando para as questões que envolvem a poluição dos mares e rios e as formas de tratamento dos resíduos), cedidos pelos autores ou instituições produtoras.

A exposição ficará patente até junho/julho de 2021 e abre a oportunidade para outras reflexões e

iniciativas. O Museu de Leiria, em colaboração com o grupo de investigadores, tem desenvolvido um programa de colóquios, visitas orientadas, projetos artísticos e de animação cultural, sobre temas relacionados com a produção e transformação dos plásticos, seus usos, diversidades e plasticidades. Fica o convite.

Mais informações em visiteleiria.pt/agenda/plasticidade-uma-historia-dos-plasticos-em-portugal.

>

Maria da Luz Sampaiomluzsampaio@gmail.com

>

Maria Elvira Callapezmecallapez@fc.ul.pt

Comissão Europeia Lança Plataforma de Partilha de Dados COVID-19 para Investigadores

A Comissão Europeia, em conjunto com vários parceiros, lançou no dia 20 de abril de 2020 uma plataforma de dados europeia COVID-19 para permitir a rápida recolha e partilha dos dados de investigação disponíveis. A plataforma, que faz parte do plano de ação ERAvsCorona, representa mais um marco nos esforços envidados pela UE para apoiar os investigadores na Europa e em todo o mundo na luta contra o surto de coronavírus.

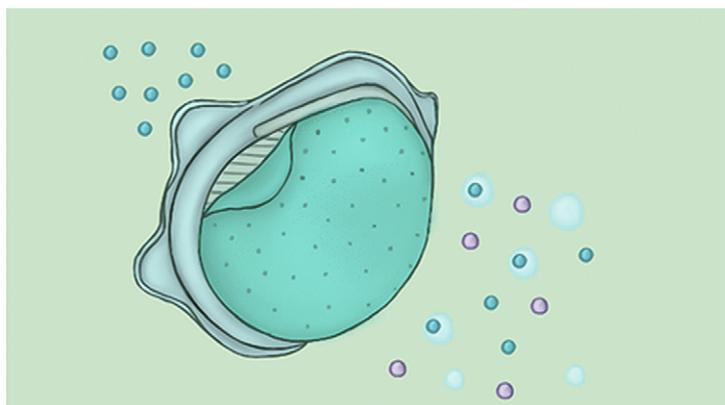
A nova plataforma proporcionará um ambiente europeu e mundial aberto, fiável e modulável, em que os investigadores poderão armazenar e partilhar conjuntos de dados, nomeadamente sequências de ADN, estruturas de proteínas, dados da investigação pré-clínica e de ensaios clínicos e dados epidemiológicos. Resulta de um esforço conjunto da Comissão Europeia, do Instituto Europeu de Bioinformática do Laboratório Europeu de Biologia Molecular (EMBL-EBI), da infraestrutura Elixir e do projeto COMPARE, assim como dos Estados-Membros da UE e de outros parceiros.

A partilha aberta e rápida de dados acelera consideravelmente a investigação e a descoberta, permitindo dar uma resposta eficaz à emergência do coronavírus. A plataforma de dados europeia COVID-19 é consonante com os princípios estabelecidos na declaração sobre a partilha de dados em caso de emergência de saúde pública e reforça o compromisso da Comissão de facultar acesso aberto aos dados de investigação e de promover a ciência aberta, com vista a tornar a ciência mais eficiente, fiável e capaz de responder aos desafios sociais. Neste contexto, a plataforma é também um projeto-piloto prioritário, que visa realizar os objetivos da Nuvem Europeia para a Ciência Aberta (EOSC) e que tira partido das redes já estabelecidas entre o EMBL-EBI e as infraestruturas nacionais de dados de saúde pública.

Toda a informação relacionada com a COVID-19 pode ser acedida em covid19dataportal.org.

>

Bruno Machadobrunofm@fe.up.pt



COVID-19: Máscaras Faciais Mais Eficientes e Reutilizáveis Baseadas num Filtro Hidrofóbico Nanoporoso

Desde o aparecimento da doença respiratória grave causada pelo novo coronavírus SARS-CoV-2, o uso de máscaras faciais tornou-se imprescindível em todo o mundo de modo a controlar a rápida disseminação desta pandemia. Como resultado, tem-se verificado uma escassez destas máscaras a nível mundial.

As máscaras mais seguras disponíveis atualmente são as FFP2, assim designadas na União Europeia (máscaras N95 nos EUA e respiradores KN95 na China). Estas máscaras têm um tamanho de poro de cerca de 300 nm, pelo que a sua eficiência de filtração para partículas sub-300 nm é de cerca de 85%. Dado que o vírus que provoca a COVID-19 apresenta um diâmetro de 65-125 nm é necessário o desenvolvimento de máscaras mais eficientes e, preferencialmente, reutilizáveis, de modo a minimizar o problema de escassez.

Muhammad Mustafa Hussain e colaboradores, da Universidade de Ciência e Tecnologia Rei Abdullah (KAUST - *King Abdullah University of Science and Technology*), Thuwal, Arábia Saudita, e Universidade da Califórnia (Berkeley, EUA), desenvolveram uma membrana nanoporosa que pode ser usada numa máscara do tipo N95 e substituída após cada utilização. Estes investigadores desenvolveram inicialmente um modelo flexível baseado em silício a partir de uma pastilha de silício revestida com uma camada de SiO_2 , que foi padronizado usando um feixe de elétrons e gravação. O padrão usado consistiu de uma rede de quadrados com dimensão de 90 nm x 90 nm. Através destes orifícios na camada de SiO_2 , a pastilha de silício foi gravada com KOH. O modelo obtido foi revestido com uma camada de cobre pulverizada para o tornar mais resistente mecanicamente.

Este modelo foi usado para preparar uma membrana polimérica hidrofóbica nanoporosa. A equipa de investigação produziu um filme de poli-imida (PI) com 10 μm de espessura sobre um substrato de

silício usando revestimento por rotação. O modelo foi colocado na camada PI e o seu padrão de orifício quadrado foi transferido para o polímero usando a gravação por plasma. O molde foi removido e a membrana polimérica flexível resultante foi descolada do substrato de silício.

Os poros da membrana polimérica têm dimensão inferior a 5 nm, a qual poderá ser ajustada por variação no tempo de gravação. De acordo com a equipa de investigação, cálculos sobre a taxa de fluxo de ar (> 85 L/min) que passa através da membrana confirmam a sua respirabilidade numa ampla diversidade de tamanhos de poros, densidades e espessuras de membranas. O polímero usado pelos investigadores é hidrofóbico, o que poderá induzir um efeito de auto-limpeza, resultante do deslizamento de gotas na área inclinada da máscara. A membrana pode ser aplicada em máscaras N95 ou equivalentes para melhorar a eficiência de filtração. O filtro pode ser trocado para uma reutilização mais segura das máscaras.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

Replaceable Filter Membrane for More Efficient Face Masks, https://www.chemistryviews.org/details/news/11242415/Replaceable_Filter_Membrane_for_More_Efficient_Face_Masks.html (acedido em 08/06/2020)

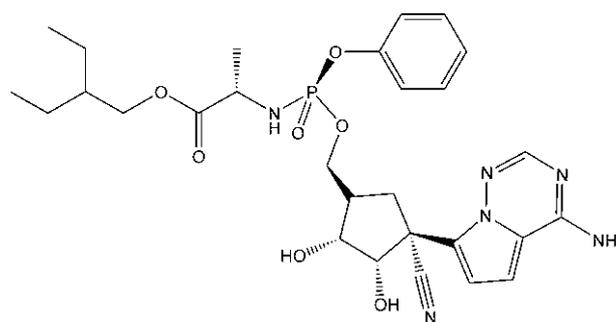
N.El-Atab, N. Qaiser, H. Badghaish, S.F. Shaikh, M.M. Hussain, *ACS Nano* (2020). DOI: 10.1021/acsnano.0c03976

Aprendendo com o Passado: Opções Urgentes para a Prevenção e Tratamento de Infecções Respiratórias Agudas Severas Causadas pelo Vírus SARS-CoV-2

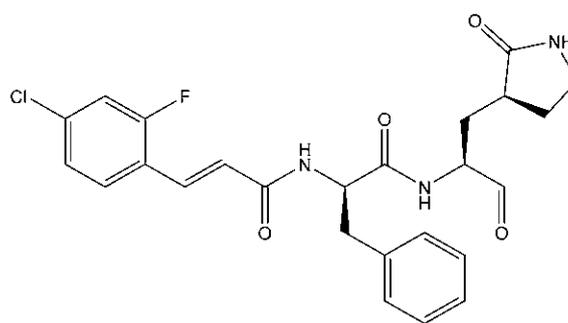
A trajetória atual do surto de 2019-nCoV (COVID-19) causado pelo vírus SARS-CoV-2, tornou necessário o desenvolvimento de medidas de saúde pública para conter a disseminação do vírus e a otimização dos tratamentos dos doentes infectados. Uma análise da sequência do genoma do SARS-CoV-2, disponível em GenBank (ID: MN908947.3), mostra uma forte homologia com o SARS-CoV. Portanto, os estudos previamente desenvolvidos sobre o SARS-CoV e a Síndrome Respiratória no Oriente Médio (MERS-CoV) podem ser usados diretamente para ajudar a tratar a COVID-19.

Wenshe Ray Liu e o seu grupo de investigação (Universidade A&M do Texas) concentraram os seus esforços no sentido de encontrar medicamentos para tratar a COVID-19.

Partindo de um pequeno conjunto de moléculas (peptídeo baseado em ACE2, remdesivir, 3CLpro-1 e novas vinilsulfonas inibidores de protease), o grupo de Liu identificou a droga antiviral remdesivir (desenvolvido para dar resposta à pandemia de Ébola em 2014) como um medicamento viável para tratar a COVID-19. No estudo, publicado no final de janeiro, os autores identificam ainda outras “pequenas-moléculas” com potencial terapêutico para a COVID-19, como por exemplo o 3CLpro-1.



remdesivir



3CLpro-1

Fontes

Chemists working on drugs to treat COVID-19, ScienceDaily, ScienceDaily, 6 Abril 2020. www.sciencedaily.com/releases/2020/04/20200406190509.htm.

J. S. Morse, T. Lalonde, S. Xu, W. R. Liu, *ChemBioChem* **21** (2020) 730-738. DOI: 10.1002/cbic.202000047

>

Marta Piñeiro

mpineiro@qui.uc.pt

SARS-CoV-2 (COVID-19) – Replicação da Informação Genética



A pandemia COVID-19 é causada pelo coronavírus SARS-CoV-2. Este vírus, para se multiplicar, tem de replicar o seu material genético precisando, para isso, das células de um hospedeiro. O processo de replicação do genoma e transcrição dos genes deste vírus é realizado por uma RNA polimerase dependente de RNA [(RdRp) - *RNA-dependent RNA polymerase*] do vírus. Esta enzima (polimerase) liga-se ao RNA do vírus e copia-o. Os fármacos que interrompam esse processo de replicação podem ser úteis no tratamento da COVID-19, dado que este complexo RdRp é o alvo para os fármacos antivirais análogos a nucleósidos. O conhecimento da estrutura da polimerase de SARS-CoV-2 durante o processo de replicação poderá fornecer informações importantes com vista à otimização de fármacos com esse modo de ação, nomeadamente o remdesivir que está atualmente em estudo. Este fármaco apresenta atividade antiviral contra coronavírus em culturas celulares e animais, inibe coronavírus RdRp e está em ensaios clínicos como um candidato a fármaco para o tratamento da doença COVID-19.

Investigadores do Instituto Max Planck de Química Biofísica, Göttingen, Alemanha, determinaram a estrutura da RdRp do SARS-CoV-2 na sua forma de replicação (foto) usando microscopia eletrónica criogénica (crio-EM). Esta técnica utiliza temperaturas muito baixas permitindo a determinação de estruturas biomoleculares em resolução quase atómica. Esta polimerase consiste de três proteínas virais (nsp12, nsp8 e nsp7). A equipa de investigação expressou estas proteínas em células de insetos ou na bactéria *Escherichia coli*, purificou-as e reconstituiu a polimerase das proteínas purificadas. Depois, adicionou o RNA modelo para formar um complexo RdRp-RNA e realizou medições pela técnica crio-EM.

O RNA modelo e o RNA copiado formam um “dúplex” (representado a azul e vermelho no lado esquerdo da figura), análogo à dupla hélice do DNA. A estrutura que este grupo de investigadores determinou contém mais de duas “voltas” desse RNA dúplex para além das proteínas enzimáticas. Extensões helicoidais longas na proteína nsp8 (na figura, a verde, acima do RNA) projetam-se ao longo do RNA dúplex. Segundo os investigadores, essas “extensões” de proteínas podem ajudar a enzima a copiar o genoma, relativamente longo, do SARS-CoV-2 num processo contínuo, evitando a dissociação do produto.

Esta equipa de investigadores acredita que os resultados obtidos podem permitir uma análise detalhada dos mecanismos de inibição usados por antivirais, como o remdesivir.

>

Ana Paula Esteves

aesteves@quimica.uminho.pt

Fontes

How SARS-CoV-2 Copies Its Genetic Information, https://www.chemistryviews.org/details/news/11238721/How_SARS-CoV-2_Copies_Its_Genetic_Information.html (acedido em 05/06/2020)

H.S. Hillen, G. Kocic, L. Farnung, C. Dienemann, D. Tegunov, Patrick Cramer, *bioRxiv* (2020). DOI: 10.1101/2020.04.27.063180

Um Mistério com 1000 Anos Resolvido: Elucidando a Estrutura Molecular de um Azul Utilizado em Manuscritos da Idade Média

A estrutura molecular da aguarela medieval conhecida como "Folium" foi finalmente resolvida no século XXI.

A abordagem interdisciplinar adotada pelos investigadores portugueses foi a chave para produzir extratos, preparados seguindo as instruções medievais, e mostra que o cromóforo azul/roxo é o corante principal da casca do fruto da *Chrozophora tinctoria*. O estudo envolveu a caracterização multi-analítica da sua estrutura usando técnicas de HPLC-DAD-MS, GC-MS, RMN (^1H , ^{13}C , COSY, HSQC, HMBC, INADEQUATE) e computacionais. O composto

azul corresponde à 6'-hidroxi-4,4'-dimetoxi-1,1'-dimetil-5'-[[3,4,5-tri-hidroxi-6-(hidroximetil)tetra-hidro-2H-pirran-2-il]oxi]-[3,3'-bipiridina]-2,2',5,6(1H,1'H)-tetraona, um derivado da hermidina, que os autores denominaram *crozoforidina*. Dados experimentais e estudos de modelação computacional mostram que o dímero monoglicosilado é representado por dois isómeros estáveis (atropisómeros), um conhecimento indispensável para a caracterização deste corante medieval em obras de arte, como iluminuras manuscritas medievais, e para testar a sua estabilidade. A *crozoforidina*, usada nos tempos antigos para fazer um lindo corante azul para pintura, não é uma antocianina - encontrada em muitas flores e frutas azuis - nem indigo, o mais estável corante azul natural. Portanto, constitui *per se* uma nova classe de moléculas antigas fontes de azul.

Os autores identificam este estudo como um ponto de partida para o desenvolvimento de novas descobertas e como uma relevante contribuição para a preservação do nosso património cultural.

>

Marta Piñeiro

mpineiro@qui.uc.pt



Crédito: Paula Nabais, Universidade NOVA de Lisboa.

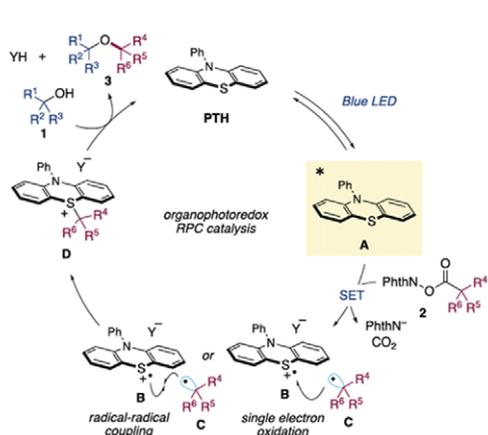
Fontes

P. Nabais, J. Oliveira, F. Pina, N. Teixeira, V. de Freitas, N. F. Brás, A. Clemente, M. Rangel, A. M. S. Silva, M. J. Melo, *Sci. Adv.* **6** (2020) eaaz7772. DOI: 10.1126/sciadv.aaz7772

As reações cruzadas de radical-polar (RPCs) ocorrem normalmente num passo único e em condições suaves usando um catalisador fotorreductor ou não fotorreductor. Como proporcionam um aumento da complexidade molecular e uma boa tolerância de grupos funcionais, são uma excelente ferramenta para a síntese de moléculas alvo, em especial na indústria farmacêutica.

Investigadores japoneses desenvolveram uma nova metodologia para RPCs usando fenotiazinas aromáticas como catalisadores fotorredutores orgânicos (10 mol%) na presença de LiBF_4 (10 mol%). A inovação desta metodologia consiste no uso de fenotiazinas com elevado potencial de redução ($E_{1/2}^* = -2,1 \text{ V vs. SCE}$) e formação de radicais persistentes, por excitação com díodos emissores de luz (LEDs) na região do azul, que iniciam o ciclo catalítico. O método consiste numa descarboxilação seguida da formação de ligações

Descarboxilação Fotocatalítica Usando Fenotiazinas e LEDs



$C(sp^3)-O-C(sp^3)$ (usando álcoois primários, secundários ou terciários), mas também pode ser usado na formação de ligações $C(sp^3)-N-C(sp^3)$ e $C(sp^3)-S-C(sp^3)$.

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

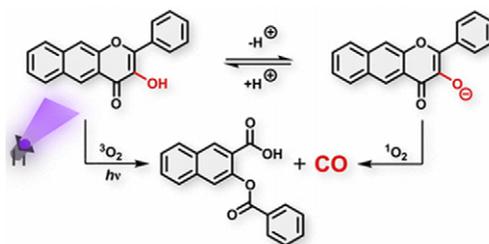
Fontes

S. Shibutani, T. Kodo, M. Takeda, K. Nagao, N. Tokunaga, Y. Sasaki, H. Ohmiya, J. Am. Chem. Soc. **142** (2020) 1211-1216. DOI: 10.1021/jacs.9b12335

O monóxido de carbono (CO) é uma molécula de sinalização molecular natural com elevada toxicidade, sendo esta resultante da elevada afinidade pela hemoglobina, por formação de carbonil-hemoglobina (COHb) que conduz a hipoxia. Contudo, em concentrações sub-micromolares (0,2 μM), o CO possui um elevado potencial terapêutico, especialmente em quimioterapia, atuando sinergicamente com fármacos convencionais (aumenta a sensibilidade das células cancerígenas). Neste sentido as moléculas geradoras de CO (CORMs) e os métodos de libertação controlada de CO são altamente desafiadores para o desenvolvimento de novas terapias.

Investigadores checos investigaram a descarboxilação de derivados de 3-hidroxiflavonas ativada por díodos emissores de luz (LEDs) (fotoCORMs). O mecanismo de fotolibertação do CO (ca. 80% rendimento), usando LEDs com emissão no azul, está relacionado com a formação de um estado excitado tripleto da 3-hidroxiflavona e subsequente reação do tautómero (ácido ou base) conjugado com oxigénio no estado tripleto. Deste modo, o mecanismo de libertação de CO é essencialmente uma reação de foto-oxigenação auto iniciada e o aumento da eficiência é dependente do rendimento quântico do cruzamento inter-sistemas.

Produção de Monóxido de Carbono por Descarboxilação de Derivados de 3-Hidroxiflavonas Usando LEDs



>

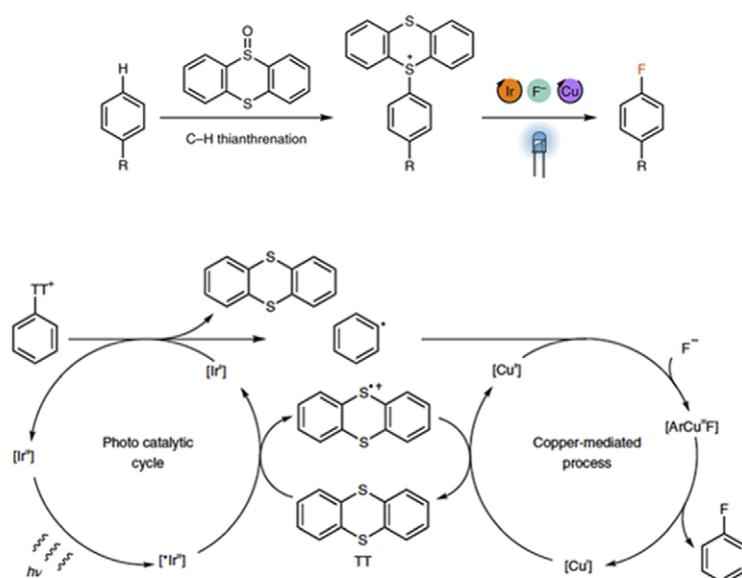
Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

Fontes

M. Russo, P. Stacko, D. Nachtigallová, P. Klán, J. Org. Chem. **85** (2020) 3527-3537. DOI: 10.1021/acs.joc.9b03248

Fluoração Seletiva por Catálise Fotorredutora Usando Sais Arilssulfônio e LEDs



A fotocatalise, em especial a catálise fotorredutora usando metais de transição, permite a realização de transformações químicas que não são facilmente acessíveis através da catálise redox convencional. A fluoração nucleofílica catalisada por paládio está bastante desenvolvida, contudo a presença de grupos funcionais contendo prótons lábeis e outros grupos que possam interferir no acoplamento cruzado (ex. halogenetos) são ainda um desafio neste tipo de metodologia; além disso, materiais de partida, tais como halogenetos de arilo, para uso em funcionalizações seletivas numa fase avançada da síntese geralmente não estão acessíveis.

Investigadores alemães e belgas desenvolveram um novo sistema fotocatalítico, baseado num ciclo catalítico de irídio e cobre, para a realização de fluorações seletivas recorrendo a sais de arilssulfônio ($E_{1/2}^* = -1,5$ V vs. SCE) e díodos emissores de luz (LEDs) na região do azul. O método foi aplicado com sucesso à síntese de diversos fármacos.

>
Vasco Bonifácio
 vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

Fontes

J. Li, Ju. Chen, R. Sang, W.-S. Ham, M.B. Plutschack, F. Berger, S. Chhabra, A. Schnegg, C. Genicot, T. Ritter, *Nat. Chem.* **12** (2020) 56-62.
 DOI: 10.1038/s41557-019-0353-3

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

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



Ana C. Albéniz



Annette
Beck-Sickinger



Mário N. d. M. S.
Berberan E Santos



Matthias Bickelhaupt



Silvia Bordiga



Uwe T. Bornscheuer



Anthony J. Burke



Gilberte Chambaud



Benoît Champagne



Iris Cornet



Pier G. Cozzi



Bas de Bruin



Gianluca Farinola



Ivana Fleischer



Katharina Fromm



Karl Gademann



Piet Herdewijn



Nicola Hüsing



Lene Hviid



Ferenc Joó



Karl Anker Jørgensen



Burkhard König



Martin Kotora



Ronald Micura



Viktor Milata



Jean-François
Nierengarten



Marcin Opałto



Pedro J. Pérez



Amélia P. Rauter



Vladimír Šindelář



Agneta Sjögren



Matthieu Sollogoub



Peter Somfai



Sir J. Fraser Stoddart



Nikos Tagmatarchis



Tomás Torres



Anna Trzeciak

Cinética Química e Dinâmica Epidemiológica

> Mário Berberan e Santos

Chemical Kinetics and Epidemiological Dynamics. *Chemical Kinetics and Epidemiology are both devoted to the evolution of populations and have common aspects. It is shown that the SIR Kermack-McKendrick model of epidemic dynamics is mathematically identical to the autocatalysis with inhibition reaction mechanism. Autocatalysis with no inhibition, which has analytical solution (the logistic curve) and is by itself relevant in population dynamics, is a pedagogically sound way of introducing the problem. After establishing the connection between kinetics and epidemic dynamics, the SIR model is discussed and applied to an epidemic case study used in textbooks, and which is used to build several scenarios of current interest. The last part of the article is devoted to the application of some results of the model to the current COVID-19 pandemic, using data from Portugal, Italy and USA.*

Tanto a Cinética Química como a Dinâmica Epidemiológica descrevem e interpretam a evolução de populações, tendo, por essa razão, muitos aspetos em comum. Neste artigo, estabelece-se o paralelo entre o modelo epidemiológico SIR de Kermack-McKendrick e a autocatálise com inibição. A autocatálise sem inibição, que possui solução analítica (a curva logística), já por si relevante em dinâmica populacional, é uma boa forma de introduzir o problema. Após estabelecer a ligação entre Cinética Química e Dinâmica Epidemiológica, apresenta-se e discute-se em pormenor o modelo SIR, que é aplicado a um caso real de epidemia viral, dado como exemplo em livros de texto, e que é usado para construir vários cenários idealizados com relevância atual. Conclui-se o artigo com a aplicação de alguns resultados do modelo à pandemia de COVID-19, usando dados de Portugal, Itália e EUA.

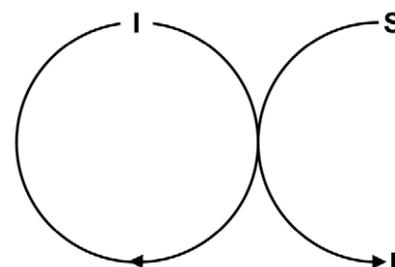
1. Autocatálise e equação logística

Considere-se a reação elementar autocatalítica [1,2]



em que S é o substrato e I o produto que catalisa a sua própria produção (definição de autocatálise). Tem de haver uma quantidade inicial não nula de produto para que a reação se possa dar. O mecanismo da reação pode ser representado pelo Esquema 1.

Esquema 1 - O ciclo catalítico da autocatálise.



Um exemplo bem conhecido de uma reação deste tipo é a conversão do tripsinogénio em tripsina (uma protease), que esta própria catalisa, e que se dá no nosso organismo durante a digestão [3].

As equações de velocidade correspondentes à eq. 1 (autocatálise quadrática) são:

$$\frac{dS}{dt} = -kSI \quad (2)$$

$$\frac{dI}{dt} = kSI \quad (3)$$

em que, por simplicidade, se omitem os parênteses retos, ou seja, S e I simbolizam as concentrações $[S]$ e $[I]$, respetivamente. A constante de velocidade k é bimolecular. As concentrações iniciais são S_0 e I_0 , tendo-se $S_0 + I_0 = S + I$. Sendo a reação irreversível, todo o S acaba por ser convertido em I , tendo-se assim $I_\infty = S_0 + I_0$. O número de moléculas de I produzidas por cada molécula de I , por unidade de tempo (frequência de conversão), é igual a kS .

A integração da eq. 3 é imediata,

$$I = I_0 \frac{I_\infty}{I_0 + S_0 \exp(-kI_\infty t)} \quad (4)$$

Esta função do tempo é designada por curva logística [4,5] (veja-se a Figura 1). Aplica-se à evolução de algumas populações de seres vivos, cujo aumento depende de alimentos, nutrientes ou outro elemento crítico, representado por S (inicialmente S_0) [5]. A mesma função foi usada na descrição do crescimento de organismos individuais [6]. Em todos estes casos, k traduz um potencial intrínseco de crescimento. A curva logística também foi utilizada em estudos demográficos pioneiros, designadamente para representar a evolução da população dos EUA entre 1790 e 1910 [7].

Segue-se da eq. 4 que o crescimento é inicialmente exponencial. De facto, para tempos curtos e para $S_0 \gg I_0$, a eq. 4 reduz-se a

$$I = I_0 \exp(kS_0 t) \quad (5)$$

Tanto a população (ou concentração) I como a velocidade de crescimento dI/dt duplicam a cada

$$T_2 = \frac{\ln 2}{kS_0} \quad (6)$$

que é, pois, apenas determinado pela frequência característica [8]. Contudo, como S vai diminuindo, a velocidade de crescimento passa por um máximo (dI/dt) no instante $t_{1/2}$ (que é o ponto de inflexão para I) e diminui a partir daí, como se mostra na Figura 1. A eq. 4 pode ser reescrita como

$$I = \frac{I_\infty}{1 + \exp[-kI_\infty(t - t_{1/2})]} \quad (7)$$

sendo $t_{1/2}$ o tempo necessário para a população atingir metade do valor máximo,

$$t_{1/2} = \frac{\ln(S_0/I_0)}{kI_\infty} \quad (8)$$

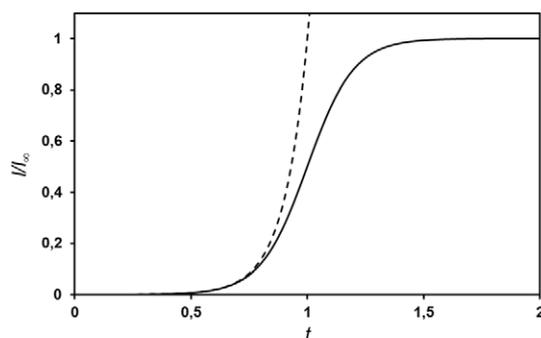


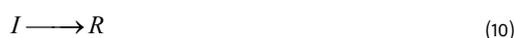
Figura 1 - O quociente I/I_∞ em função do tempo, de acordo com a eq. 4, para $I_0 = 4,54 \times 10^{-5}$, $S_0 = 1 - I_0$, e $k = 10$, o que dá $t_2 = 0,07$ e $t_{1/2} = 1$ (unidades arbitrárias). A linha tracejada corresponde à extrapolação da exponencial, eq. 5.

Resulta da eq. 8 que o tempo é tanto mais longo quanto menor for o valor inicial de I , I_0 (aumentando o tempo de indução) ou mais elevado o valor inicial de S , S_0 (mais substrato disponível para o crescimento). O tempo de duplicação diminui com o aumento da constante de velocidade.

É de referir que o crescimento de culturas de bactérias (I), que inicialmente se pensava seguir a curva logística [9], é afinal melhor descrito pelo mecanismo de Monod [10], que tem em conta a “saturação” a partir de um certo nível de substrato,

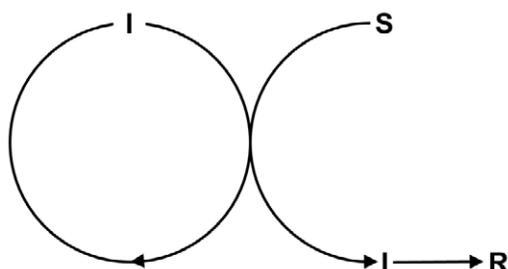


O mesmo se aplica a reações autocatalíticas, como a já referida conversão tripsinogénio-tripsina [3]. Ignorando este ponto, não essencial para a presente discussão, podemos perguntar o que sucederia se existisse uma reação competitiva que levasse à desativação irreversível do catalisador I . Tanto poderia ser uma reação unimolecular elementar, como uma reação com outro composto em excesso (por exemplo um inibidor), em ambos os casos:



sendo R um certo produto, Esquema 2.

Esquema 2 - O ciclo catalítico da autocatálise com inibição irreversível.

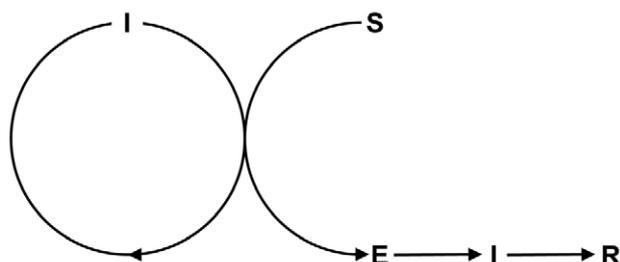


Nesta situação, o catalisador I deixa de ser um produto, e passa a ser um intermediário instável, que acaba por desaparecer. Podemos, assim, encarar esta reação como uma reação consecutiva $S \rightarrow I \rightarrow R$, em que o primeiro passo tem autocatálise. Esta introduz duas diferenças em relação à reação não catalisada: (i) Para a reação ocorrer, o «intermediário» tem de estar presente inicialmente; (ii) A reação, apesar de irreversível, pode terminar sem que todo o S seja consumido. Uma tal situação é formalmente equivalente a um modelo básico de epidemiologia, o modelo de Kermack-McKendrick, que se discute em seguida.

2. Dinâmica epidemiológica: o modelo SIR de Kermack-McKendrick

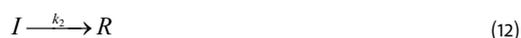
A dinâmica de transmissão de uma doença infecciosa no seio de uma população homogénea e fixa (humana ou animal) pode ser descrita, em primeira aproximação, por um modelo matemático análogo ao da autocatálise com desativação do catalisador. O modelo básico, ainda hoje importante, foi proposto por Kermack e McKendrick há quase um século [11] e é conhecido

pelos seus nomes: modelo SIR de Kermack-McKendrick [12-14], pela razão que se verá já de seguida. Neste modelo, a população é dividida em três categorias: Suscetíveis (S), que podem contrair a doença; Infetantes (ou Infeciosos), I , que podem transmitir a doença aos suscetíveis; e Removidos, R , que são infetantes entretanto curados e imunizados, ou falecidos que sucumbiram à doença (continuam a ser contabilizados para que a população se mantenha constante). Para além da imunização, admite-se no modelo que o período de latência é desprezável, ou seja, um indivíduo fica contagioso, assim que é infetado. De outra forma, é necessário considerar uma quarta categoria, os Expostos (infetados, mas ainda não contagiosos), e o modelo passa a ser o SEIR, Esquema 3.



Esquema 3 - Representação do modelo SEIR.

O modelo também pressupõe uma mistura perfeita de suscetíveis e infetantes, em resultado de completa liberdade de movimento no espaço do sistema (correspondente, em termos químicos, a uma reação em fase gasosa em recipiente fechado, ou a uma reação em fase líquida num reator contínuo com agitação), por forma a garantir homogeneidade. Com estas hipóteses, o modelo pode ser descrito, em linguagem da Cinética Química, pelo seguinte esquema:



O primeiro passo tem em conta o processo de transmissão da infeção, que se dá por encontro de um infetante com um suscetível, sendo k_1 a constante de velocidade do processo de infeção (que se admite não variar no tempo, como pode suceder através de mutações no agente patogénico ou de intervenção humana sobre as condições de transmissão). Traduz a frequência de contactos e ainda a probabilidade de transmissão

num contacto, de forma semelhante à da constante de velocidade de uma reação bimolecular elementar, tal como formulada pela Teoria das Colisões, que em solução se escreve $k_1 = p k_d$, em que k_d é a constante de velocidade para um processo controlado pela difusão e p é a probabilidade de transmissão (reação) num encontro. Porém, ao contrário de uma reação elementar, em que se verifica o princípio da reversibilidade microscópica, este processo é completamente irreversível. O segundo passo representa a imunização ou morte dos infetantes, que se tornam dessa forma elementos da categoria dos removidos, precisamente por serem retirados do processo de contágio, sendo k_2 a constante de velocidade de remoção, e que é uma probabilidade de transição por unidade de tempo. O sistema de equações de velocidade correspondentes ao mecanismo é, assim [11-14]:

$$\frac{dS}{dt} = -k_1 SI \quad (13)$$

$$\frac{dI}{dt} = k_1 SI - k_2 I = k_2 I \left(\frac{k_1 S}{k_2} - 1 \right) \quad (14)$$

$$\frac{dR}{dt} = k_2 I \quad (15)$$

Uma vez que R não figura nas duas primeiras equações, o problema reduz-se, na prática, a um sistema de duas equações diferenciais (autónomas e não lineares). A dinâmica é determinada por quatro parâmetros: (i) Número inicial de suscetíveis, S_0 ; (ii) Número inicial de infetantes, I_0 (que se supõe serem misturados com os suscetíveis no instante inicial). I_0 é normalmente muito menor do que S_0 (pode mesmo ser um único indivíduo, veja-se o exemplo da Secção 3); (iii) Constante de velocidade k_1 que reflete a probabilidade de transmissão; (iv) Constante de velocidade k_2 que reflete a duração média de um infetante (é tanto maior quanto menor esta for).

Supõe-se habitualmente, sem perda de generalidade, que não há inicialmente elementos da categoria dos Removidos. Assim, R é dado por $R = S_0 + I_0 - (S + I)$. Considerando a duração típica de uma epidemia, os processos de nascimento e morte (por outras causas) bem como emigrações e imigrações, podem ser desprezados.

Nas equações cinéticas, o número de elementos de cada classe deve, em rigor, ser substituído por uma concentração (por exemplo densidade populacional para a categoria em questão) mas, dado que a área (ou o volume) são fixos, este efeito é incorporado no valor da constante de velocidade k_1 . Apenas

quando se pretende comparar sistemas diferentes é necessário ter isto em conta.

Se os infetantes não chegassem a ser misturados com os suscetíveis no instante zero, o seu número decresceria com o tempo segundo uma lei exponencial:

$$I = I_0 \exp(-k_2 t) \quad (16)$$

O período infeccioso médio, τ , que é também o tempo médio de recuperação de um infetante (desprezando a possibilidade de morte) é definido por:

$$\tau = \frac{1}{k_2} \quad (17)$$

que é o tempo de decaimento da eq. 16.

A grandeza $E = k_1 SI$ é muito importante, pois significa o número de novos casos (infetantes) por unidade de tempo (normalmente por dia), como resulta da eq. 14. Ao seu andamento, $E(t)$, dá-se o nome de *curva epidemiológica* [13,14]. A curva dos infetantes, $I(t)$, tem sempre um atraso em relação a esta, pois o efeito dos novos casos é cumulativo [15].

A grande diferença do mecanismo em análise em relação ao da autocatálise pura (sem inibição) é o facto de o número de infetantes não aumentar necessariamente com o tempo. O resultado é claro considerando a eq. 14: para a derivada ser positiva a tempo zero, tem de se verificar que

$$\frac{k_1 S_0}{k_2} > 1 \quad (18)$$

havendo, portanto, um valor mínimo de suscetíveis, dito *limiar* ou *crítico*, S_c [11-13]:

$$S_0 > S_c = \frac{k_2}{k_1} \quad (19)$$

Se o número inicial de suscetíveis for inferior a este valor, o número de infetantes diminui com o tempo, e a epidemia não acontece (embora possa haver um número apreciável de infetados subsequentes). A explicação é, obviamente, que a velocidade de remoção supera a velocidade de produção de infetantes. No artigo original [9], Kermack e McKendrick especulam que a existência do número crítico S_c poderia justificar

que, em certas regiões de doenças contagiosas de letalidade elevada e endêmicas, as populações não ultrapassassem um determinado valor.

Outro parâmetro importante é o *número básico de reprodução* da infecção, R_0 [12-14], definido como o número médio de suscetíveis infetados por um infetante, antes de este se transformar em removido: É o equivalente ao número médio de ciclos por catalisador (*turnover number*), aqui também um fator de multiplicação por ser autocatalise. O valor refere-se normalmente ao instante inicial, daí o índice.

Esta grandeza adimensional define-se a partir da eq. (18),

$$R_0 = \frac{k_1 S_0}{k_2} = \frac{S_0}{S_c} \quad (20)$$

Segue-se desta relação que a epidemia se pode instalar se $R_0 > 1$. Para instantes posteriores, quando S já é inferior a S_0 , ou quando k_1 varia com o tempo, define-se o parâmetro R_t ,

$$R_t = \frac{k_1 S}{k_2} \quad (21)$$

Para demonstrar o significado de R_0 note-se que a velocidade de infecção *por infetante* é:

$$\frac{E}{I} = k_1 S \quad (22)$$

A tempo zero, esta tem o valor

$$\frac{E(0)}{I_0} = k_1 S_0 \quad (23)$$

Finalmente, usando o período infeccioso médio τ , o número básico de reprodução fica

$$R_0 = k_1 S_0 \tau \quad (24)$$

Note-se que este valor é uma média: os infetados por infetante inicial obedecem, em primeira aproximação, a uma distribuição geométrica de média R_0 . Assim, para $R_0 = 2,5$, por exemplo, a probabilidade de um infetado inicial não infetar ninguém antes de passar a removido é de 0,29. Dos 71% de infetantes iniciais que de facto infetam, 29% infetam uma pessoa, 20% infetam duas, 15% infetam três, 10% infetam quatro, 7% infetam cinco, etc. Conhecem-se, para algumas

doenças muito contagiosas, valores de R_0 que atingem 15 e mais, embora sejam mais comuns valores entre 1,5 e 5 [16]. O valor de R_0 reflete não só os aspetos intrínsecos da doença, mas também as condições específicas da população (frequência de contactos, probabilidade de transmissão). Para a COVID-19 em Wuhan, por exemplo, o valor inicial de R_0 (janeiro de 2020) foi estimado em 2,35 (ou 2,5 [18]), descendo em duas semanas para 1,05 após a imposição de restrições à circulação [17]. No início da epidemia, quando S_0 é aproximadamente constante, o número de infetantes cresce exponencialmente,

$$I = I_0 \exp[(k_1 S_0 - k_2)t] \quad (25)$$

Compare-se com a eq. 5, e o *tempo de duplicação* dos infetantes, T_2 , é dado por

$$T_2 = \frac{\ln 2}{k_1 S_0 - k_2} = \frac{\tau \ln 2}{R_0 - 1} \quad (26)$$

Compare-se com a eq. 6. Esta equação permite estimar R_0 numa fase inicial da epidemia, caso τ já seja conhecido a partir de pacientes já recuperados (ou falecidos) [16]:

$$R_0 = 1 + \ln 2 \left(\frac{\tau}{T_2} \right) \quad (27)$$

Na Tabela 1, apresentam-se valores de R_0 calculados com parâmetros na gama de aplicabilidade à pandemia da COVID-19 [18]:

Tabela 1 - Valores de R_0 calculados com a eq. 27

		τ/d		
		7	14	21
T_2/d	2	3,4	5,9	8,3
	3	2,6	4,2	5,9
	4	2,2	3,4	4,6
	5	2,0	2,9	3,9
	6	1,8	2,6	3,4

A eq. 27 tem também interesse para avaliar a rapidez de progressão inicial de uma epidemia, conhecidos o R_0 e o τ . Por exemplo, se $R_0 = 2,5$ e $\tau = 7$ d, vem $T_2 = 3,2$ d. Isto explica a necessidade de as medidas de contenção serem tomadas com rapidez.

Para combater uma epidemia, e extingui-la, se possível, é necessário baixar o valor de R_0 (aumentar o valor de S_c) através de: (i) Decréscimo do valor de $k_1 S_0$, por redução da frequência de contacto (isolamento de suscetíveis e de infetantes, quarentena) e da eficiência de infeção no contacto (distanciamento social, medidas de proteção pessoal, aumento da higiene pessoal e do meio, tanto para suscetíveis como para infetantes); (ii) Aumentar o valor de k_2 , por tratamento médico dos infetantes (sendo a outra razão a preservação das suas vidas).

A vacinação em massa também tem uma importância grande, pois traduz-se por uma transferência direta da categoria dos Suscetíveis para a categoria dos Removidos, sem passar pela categoria dos Infetantes, reduzindo simultaneamente o valor de S . É, assim, possível descer abaixo do valor crítico, tornando a epidemia inviável por se ter atingido a *imunidade de grupo*, e isto sem que haja, sequer, infetados. Por exemplo, no caso de uma vacinação de frequência constante, e com início a tempo zero, o sistema de equações de velocidade fica:

$$\frac{dS}{dt} = -k_1 SI - k_3 \quad (28)$$

$$\frac{dI}{dt} = I(k_1 S - k_2) \quad (29)$$

$$\frac{dR}{dt} = k_2 I + k_3 \quad (30)$$

sendo k_3 a velocidade de vacinação, que aqui corresponde a um processo de ordem zero.

Deve notar-se que o modelo SIR não tem memória: a sua dinâmica não é afetada pelos estados anteriores, e uma alteração nos parâmetros (e.g. k_1) ou condições (e.g. vacinação) num dado momento, produz efeitos a partir desse momento. Define-se, pois, uma nova origem dos tempos (ver o exemplo na Secção 3).

A entrada (ou saída) de infetantes no sistema (por exemplo viajantes) pode ser traduzida por uma função de entrada/saída $A(t)$,

$$\frac{dI}{dt} = A(t) + I(k_1 S - k_2) \quad (31)$$

Consideremos o caso mais simples (sem entrada ou saída de infetantes nem vacinação), tal como feito por Kermack e McKendrick, eqs. 13-15. Devido aos termos não lineares, não é possível obter uma solução analítica explícita para o sistema de equações

diferenciais, e a evolução temporal tem de ser obtida por integração numérica ou recorrendo a aproximações. São, contudo, possíveis alguns resultados analíticos, como se discute de seguida.

A eliminação do tempo das eqs. 13 e 14 dá [11-14]

$$\frac{dI}{dS} = \frac{S_c}{S} - 1 \quad (32)$$

cuja integração conduz a uma relação entre I e S :

$$I = I_0 + S_0 - S + S_c \ln \left(\frac{S}{S_0} \right) \quad (33)$$

Este é um dos resultados básicos do modelo. O valor máximo de I dá-se para $S = S_c$, como se segue da eq. 32, ou, em termos de parâmetros reduzidos (v. Figura 3),

$$\frac{S_c}{S_0} = s_c = \frac{1}{R_0} \quad (34)$$

A eq. 33 leva a [11-14]

$$I_{\max} = I_0 + S_0 - S_c + S_c \ln \left(\frac{S_c}{S_0} \right) \quad (35)$$

que pode ser reescrita como

$$i_{\max} = 1 + i_0 - \frac{1}{R_0} (1 + \ln R_0) \quad (36)$$

sendo $i_{\max} = I_{\max}/S_0$ e $i_0 = I_0/S_0$. Neste ponto de viragem da epidemia, em que se atinge a *imunidade de grupo*, o número de removidos é

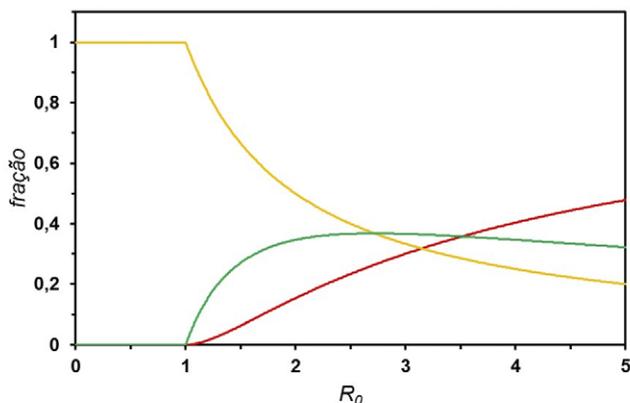
$$R_{\max} = I_0 + S_0 - I_{\max} - S_c = -S_c \ln \left(\frac{S_c}{S_0} \right) \quad (37)$$

ou

$$\frac{R_{\max}}{S_0} = \frac{\ln R_0}{R_0} \quad (38)$$

A fração relativa de cada uma das classes no pico da epidemia, eqs. 31, 33 e 35, é apresentada na Figura 2 para $i_0 \ll 1$. Para R_0 ligeiramente acima de 1, a fração de infetantes é muito pequena, mas aumenta de forma pronunciada com R_0 , excedendo mesmo as das outras duas categorias para $R_0 > 3,5$.

Figura 2 - A fração de cada uma das três categorias (relativa à população total), no ponto máximo da epidemia (máximo de infetantes) em função do número básico de reprodução. Suscetíveis, a amarelo; Infetantes, a vermelho; Removidos, a verde. Supõe-se que $i_0 \ll S_0$.



Observa-se ainda que, para valores elevados de R_0 , a fração de removidos diminui com R_0 . Desta forma, R é desprezável para R_0 alto, e a curva logística, eq. 4, aplica-se a S e a I .

É útil ter uma expressão explícita para S em função de I , isto é, resolver a eq. 33 em ordem a S . Isto só é possível fazendo uso da função de Lambert, $W(x)$ [19]:

$$\frac{S}{S_0} = -\frac{1}{R_0} W_{-1} \left(-R_0 e^{-(1+i_0-i)R_0} \right) \quad \text{se } S \geq S_c \quad (39)$$

$$\frac{S}{S_0} = -\frac{1}{R_0} W_0 \left(-R_0 e^{-(1+i_0-i)R_0} \right) \quad \text{se } S \leq S_c \quad (40)$$

sendo $W_0(x)$ a função calculada no seu ramo principal e $W_{-1}(x)$ a função calculada no ramo secundário. Usando as eqs. 39 e 40, pode calcular-se diretamente o valor de S em qualquer ponto da epidemia. Por exemplo, quando os infetantes atingem o seu valor máximo, a eq. 36 é válida e, substituída na eq. 39 ou na eq. 40, dá $S_{max}/S_0 = 1/R_0$, como esperado. O valor final de S (no fim da epidemia), S_∞ , também se obtém da eq. 40, desta vez fazendo $i = 0$:

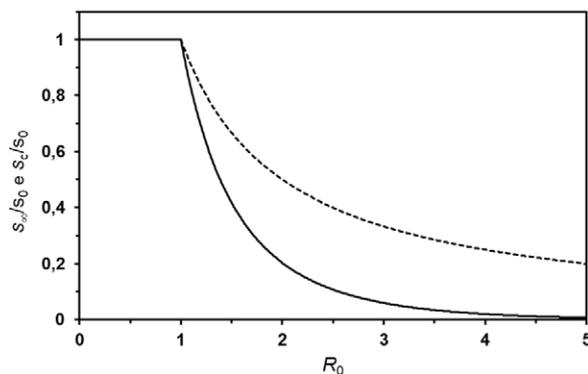
$$\frac{S_\infty}{S_0} = -\frac{1}{R_0} W_0 \left(-R_0 e^{-(1+i_0)R_0} \right) \quad (41)$$

Admitindo que $I_0 \ll S_0$, como é normalmente o caso, é possível ajustar uma função simples e precisa (para $R_0 > 1$) [19], com o comportamento assintótico correto:

$$\frac{S_\infty}{S_0} = \exp(-R_0) + 2,462 \exp(-1,851R_0) + 8,798 \exp(-3,580R_0) \quad (42)$$

A dependência de S_∞/S_0 com R_0 está representada na Figura 3. Como já referido, para $R_0 < 1$ não há epidemia, e o número de suscetíveis não diminui significativamente (admitindo $I_0 \ll S_0$). A fração de população que não contrai a doença é de 40% para $R_0 = 1,5$, 20% para $R_0 = 2$, e de 6% para $R_0 = 3$. Para $R_0 > 5$, praticamente toda a população é infetada. Representa-se na mesma figura a fração de suscetíveis necessária para se atingir a imunidade de grupo, S_c/S_0 , eq. 34. Atingida esta fração, embora a doença se continue a propagar, o número de infetantes começa a diminuir. Para $R_0 = 2,5$, por exemplo, a fração crítica de suscetíveis é de 0,4, ou seja, 60% da população já terá sido infetada no instante em que se atinge a imunidade de grupo. Isto não quer dizer que a epidemia acabe nesse momento, apenas se passa a propagar cada vez mais devagar. Com efeito, a eq. 42 (v. também Fig. 3) indica que, no fim da epidemia, apenas 11% da população terá escapado à doença, ou seja, após a passagem do ponto crítico ainda há mais 29% da população que fica infetada.

Figura 3 - Fração da população que escapa à doença, S_∞/S_0 , em função do número básico de reprodução, R_0 (eqs. 41 e 42, linha contínua). Fração de suscetíveis correspondente à imunidade de grupo (eq. 34, linha tracejada). Admite-se que $I_0 \ll S_0$.



3. Exemplo de aplicação do modelo SIR

Como primeiro exemplo de aplicação, considere-se um caso simples e elucidativo [20], citado num livro de texto [12]: um surto de gripe A (vírus H1N1) num colégio interno inglês, em janeiro-fevereiro de 1978 [20]. A origem desta pandemia de gripe em 1977/8, que atingiu principalmente jovens com menos de 20 anos por o vírus ser recorrente (1957 e anos anteriores), foi atribuída a ensaios descontrolados de vacinação em militares chineses [21]. No colégio existiam 763 rapazes com idades entre 10 e 18 anos, sendo a grande maioria internos. Após as Férias de Natal, um dos alunos, regressado de Hong-Kong, apresentou sintomas de gripe. Ao fim de uma semana, surgiram mais casos. O número de alunos acamados (durante 3 a 7 dias, depois convalescentes) é dado na Tabela 2, obtido a partir do gráfico publicado [20]:

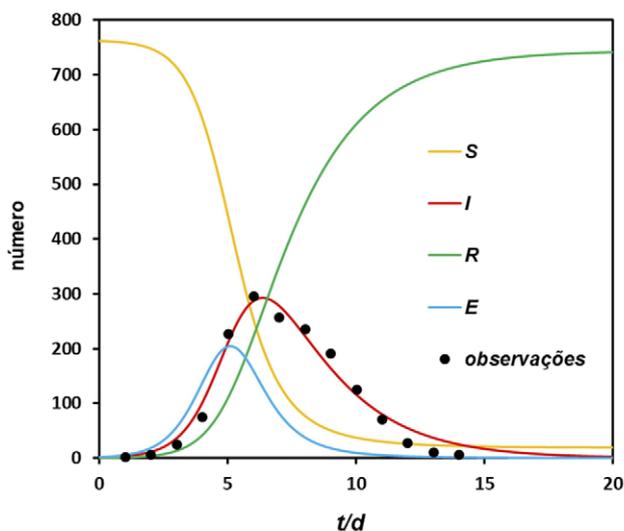


Figura 4 - Exemplo do surto no colégio interno [20]: observações e curvas do modelo.

Tabela 2 - Número de infetantes em cada dia

Dia	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Infetantes	3	6	25	75	227	296	258	236	192	126	71	28	11	7

Estes alunos são considerados infetantes, presumivelmente por não estarem isolados. Dos cerca de 130 adultos do colégio, apenas um teve sintomas. A partir de um ajuste pelo método dos mínimos quadrados não linear, recorrendo a integração numérica com $I_0 = 1$ e $S_0 = 762$, obtiveram-se as seguintes constantes de velocidade: $k_1 = 2,2 \times 10^{-3}$ pessoa⁻¹ d⁻¹ e $k_2 = 0,44$ d⁻¹. Estes valores estão em completa concordância com os apresentados em [12]. Com os parâmetros determinados, obtiveram-se as curvas dadas na Figura 4, e os parâmetros da Tabela 3 (com incertezas associadas de alguns %). Observa-se uma boa concordância geral, embora não perfeita, mas não se pode esperar mais do modelo. O número de novos casos por dia (E) terá atingido cerca de 205 no 5º dia. O máximo desta curva antecede sempre o máximo da curva dos infetantes (I), como se referiu [15]. O número total de infetantes chegou a ser de 293 no 6º dia (40% do total de alunos). Ao fim de duas semanas, o surto estava praticamente extinto, tendo atingido cerca de 98% dos alunos. O parâmetro R_0 (3,8) indica uma situação de rápida e extensa propagação, como se verificou.

Uma outra forma de apresentar os resultados é a representação no espaço das fases, Figura 5, em que o estado do sistema num dado instante corresponde ao ponto (S, I). O sistema evolui da direita para a esquerda, segundo a eq. 33. Os pontos 1 a 4 assinalam as várias fases do surto.

Figura 5 - Evolução do sistema no espaço das fases. 1- Estado inicial (1.º dia); 2- Máximo do número diário de novos casos (5.º dia); 3- Máximo do número de infetantes (6.º dia); 4- Fim do surto (ca. 14.º dia). Veja-se a Figura 4, para comparação.

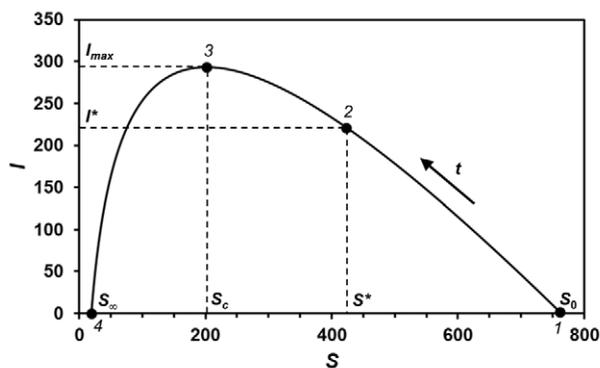


Tabela 3 - Parâmetros e grandezas calculados

Grandeza ou parâmetro	T_2/d	τ/d	S_c	R_0	t^*/d	E^*	S^*	t_{max}/d	I_{max}	S_{∞}
Valor	0,57	2,3	202	3,8	5,1	205	420	6,4	293	19

Tem interesse ver o que se poderia ter passado, se tivesse havido um maior número inicial de infetantes. Na Figura 6 considera-se $I_0 = 20$. A existência inicial de 20 casos faz com que o tempo para se atingir o máximo de I diminua apreciavelmente, passando para 3,9 dias (diminuição do tempo de indução), mas apenas subindo o I_{max} , de forma moderada, para 313 (eq. 35). A situação é quase equivalente a ir procurar no caso original o instante em que $I = 20$, e fazer dele a nova origem dos tempos. Isto sucede assim pois S quase não se afasta de S_0 nesse intervalo, o que já não acontece para valores de I_0 muito mais elevados. Este exemplo calculado mostra que se o número inicial de infetantes for reduzido, o seu efeito é muito semelhante, independentemente de quantos forem. Só o tempo de indução é afetado de forma importante.

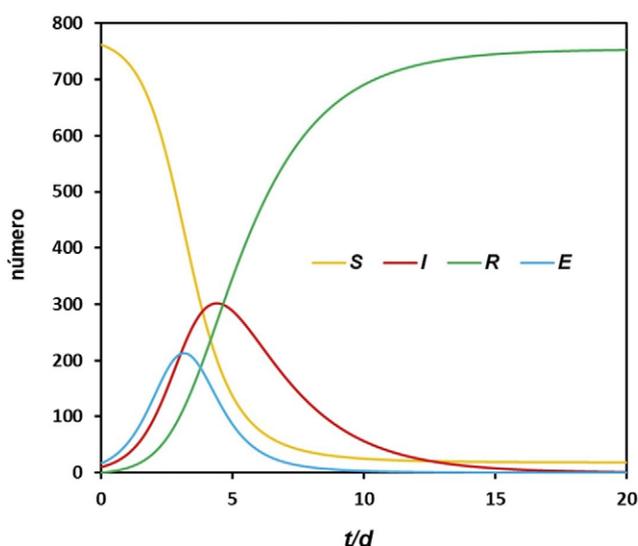


Figura 6 - Parâmetros idênticos aos da Fig. 4, com a exceção de $I_0 = 20$.

Também se pode estudar o efeito de uma redução intencional de k_1 durante o surto (o chamado «achatamento da curva»). Suponhamos que, no 4.º dia ($S = 621$), devido a medidas de contenção e isolamento, k_1 desce para metade do valor inicial, Figura 7. O novo R_0 , calculado para essa nova origem dos tempos (usando $S = 621$), seria de 1,5 (em vez de 3,1, sem alteração de k_1), portanto ainda há subida ($R_0 > 1$), mas menos pronunciada. Como se vê, o valor de I_{max} (143) desce para cerca de metade, e o número de suscetíveis que não contraem a doença (153) aumenta muito. Contudo, pode não ser possível manter as medidas de contenção indefinidamente (neste exemplo a população é pequena, e os tempos também; não é assim noutros casos).

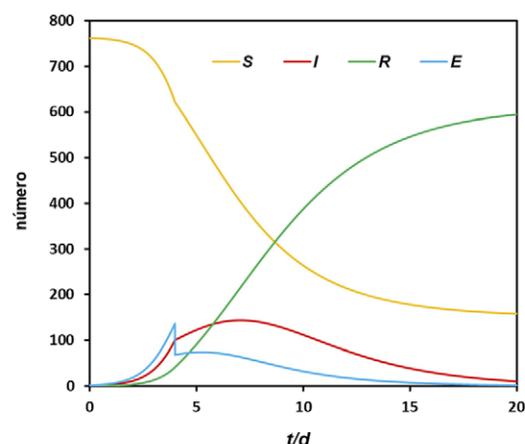


Figura 7 - Idêntico à Fig. 4, mas com redução brusca de k_1 para metade a partir do 4.º dia.

Que sucederia se, no 10.º dia ($S = 266$), as medidas de contenção fossem abolidas e o k_1 voltasse ao valor inicial? É o que se mostra na Figura 8. Não haveria novo surto significativo, pois o R_0 seria ligeiramente superior a 1 ($S_c = 202$), mas o número de suscetíveis que não contraem a doença (54) diminuiria consideravelmente, em relação ao caso anterior.

Na Figura 9 considera-se uma situação semelhante, mas em que as medidas de contenção foram mais drásticas, e a constante k_1 caiu para um décimo do valor inicial. Nesse caso o R_0 passa para 0,31, situação (muito) subcrítica. O número de infetantes decai exponencialmente (com um tempo de vida τ), e o de suscetíveis mantém-se praticamente constante. Assim, a situação fica «congelada», mantendo-se o potencial epidémico, uma vez que S permanece muito acima do valor crítico, S_c . Em consequência, quando se levantam as medidas de contenção (10.º dia), e o k_1 volta ao valor inicial, dá-se um novo surto (a «segunda vaga»), que só esmorece quando S desce, finalmente, abaixo do valor crítico.

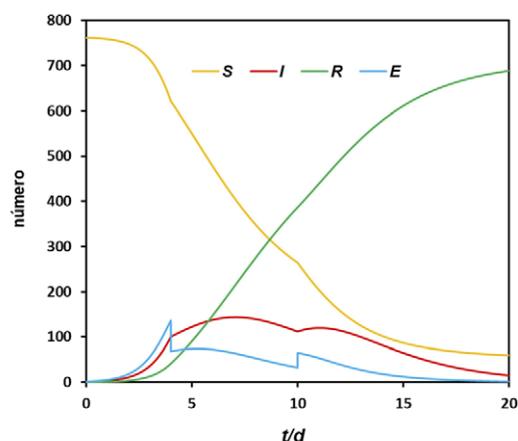


Figura 8 - Idêntico à Fig. 7, mas com reposição do k_1 inicial no 10.º dia.

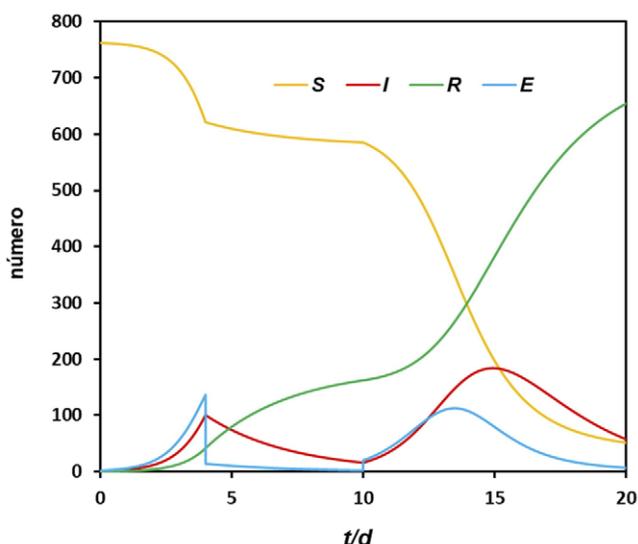


Figura 9 - Semelhante à Fig. 8, mas com redução de k_1 para 1/10 entre o 4.º dia e o 9.º dia, e reposição do valor inicial no 10.º dia.

Na ausência de vacina ou terapia eficaz, uma boa forma de converter os suscetíveis em removidos é, pois, manter o R_t (eq. 21) constantemente igual a 1, o que permite fixar o número máximo de infetantes. Isto implica que, depois de um corte significativo inicial, se aumente progressivamente k_1 , aproximando-o do valor inicial (vida sem restrições), à medida que o S vai diminuindo. É o que se exemplifica nas Figuras 10 e 11. Fixando, por exemplo, um limite superior para os infetantes de 100, assim que este número é atingido, a constante de velocidade k_1 é reduzida para um valor que impede mais crescimento, ou seja, para que o R_t se fixe em 1, o que é conseguido com

$$k_1(t) = \frac{k_2}{S} \tag{43}$$

Deste modo, k_1 vai subindo progressivamente, até que, quando $S = S_c$, iguala o valor original (valor “natural”), Figura 10, acabando nesse momento as medidas restritivas.

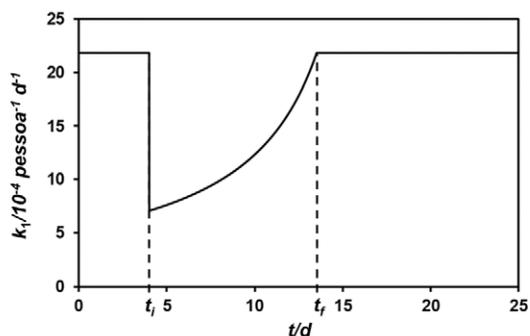


Figura 10 - Evolução de k_1 , reduzido pelas medidas restritivas entre t_1 (4 dias) e t_2 (14 dias).

Isto evita qualquer subida posterior do número de infetantes, e tem-se a evolução que se apresenta na Figura 11, em que o período com restrições é o menor possível (neste caso cerca de 10 dias). Note-se que tanto S como R variam linearmente no período em que I é constante (como resulta da eq. 13 e da constância do número total de pessoas), e, portanto, k_1 varia nesse período de forma hiperbólica (v. eq. 43 e Fig. 10).

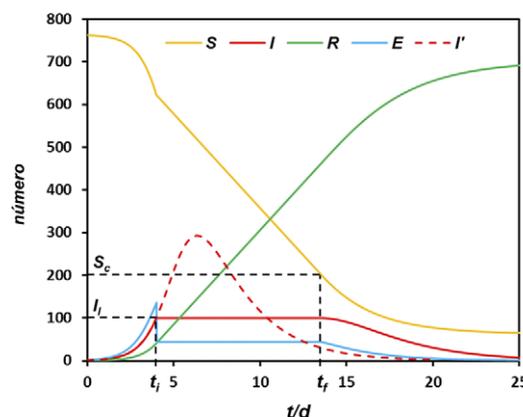


Figura 11 - Evolução do sistema com controlo da constante de velocidade k_1 de tal forma que nunca ultrapassa o limite I (neste caso 100). Também se representa, para comparação, a evolução original de I (linha vermelha a tracejado), sem controlo (compare-se com a Fig. 4).

O número de suscetíveis não infetados, S_{co} , pode ser calculado usando a eq. 41, mas em que S_0 é substituído por S_c , e i_0 é substituído por I/S_c , o que dá 61 pessoas.

4. O modelo SIR e a COVID-19

O modelo SIR, puramente determinístico, baseia-se num certo número de aproximações drásticas, designadamente que cada categoria (em especial S e I) tem, desde o início, uma distribuição espacial homogénea. Contudo, exceto para situações como a do colégio apresentada acima, uma descrição mais realista será a de um conjunto de compartimentos comunicantes, cada um com a sua densidade e números iniciais, situação mais próxima de um sólido poroso ou de uma rede de reatores do que de um só reator macroscópico. De notar que a divisão por categorias não implica uma «reatividade» única. Mesmo no caso molecular, a constante k_1 resulta de uma média sobre energias (distribuição de Boltzmann, contudo existe ergodicidade, ou seja, cada molécula vai passando pelos vários estados energéticos).

Na forma mais simples, admite-se ainda que a constante k_1 não varia com o tempo (mas no exemplo acima considerou-se o efeito dessa variação).

Como uma primeira aproximação, que representa um compromisso variável entre rigor e simplicidade,

o modelo SIR pode ser aplicado a regiões, países ou, até, no limite dos limites, ao mundo!

Um aspeto importante que distingue a Cinética Química da Epidemiologia é a qualidade dos dados experimentais. Numa área as experiências são controladas e podem repetir-se, na outra há muitas incertezas envolvidas na obtenção dos dados, e a repetição é impossível (pelo menos com seres humanos). O número registado de infetados, por exemplo, depende, no caso da COVID-19, do número de testes realizados, e é um minorante do número real (que pode ser estimado, mas não obtido diretamente, na maioria dos casos). Em certos países os números são baixos não só por falta de testes (deliberadamente ou por escassez de meios) mas também por os resultados, suspeita-se, serem manipulados. Mesmo o número de mortes pode ser inferior ao real, ao serem atribuídas a outras causas. O contrário também é possível, como sucedeu em Espanha, em que havia quase duas mil mortes a mais, depois removidas em bloco das estatísticas. Também as datas em que são feitos os registos podem diferir das datas verdadeiras (diferenças de alguns dias). Em todo o caso, o número de mortes (quando em número significativo) parece ser um conjunto de dados relativamente robusto, pelo menos para alguns países.

A eq. 14 permite calcular R_t ,

$$R_t = 1 + \frac{1}{k_2 I} \frac{dI}{dt} \quad (44)$$

Infelizmente, o número de infetantes e a sua variação diária não são fáceis de estimar. Por outro lado, a eq.

15 relaciona o número de novos removidos por dia,

$$\dot{R} = \frac{dR}{dt},$$

com o número de infetantes, I . Admitindo

que o número de mortes por dia, $\dot{M} = \frac{dM}{dt}$, é uma

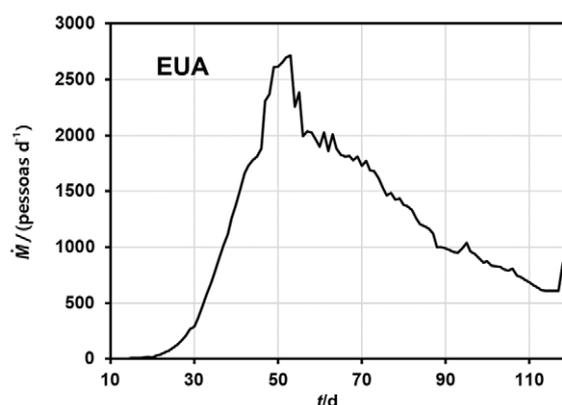
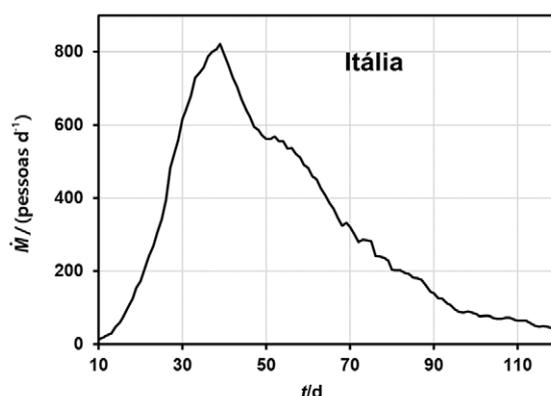
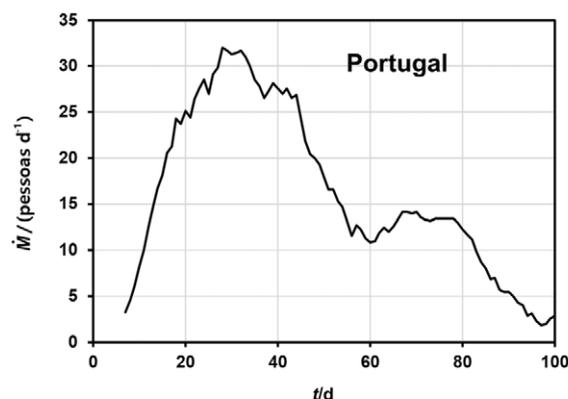
fração fixa do número diário de removidos, \dot{R} , (hipótese

razoável no âmbito do modelo SIR), segue-se que \dot{M} e I são proporcionais, donde

$$R_t = 1 + \frac{1}{k_2 \dot{M}} \frac{d\dot{M}}{dt} = 1 + \tau \frac{d \ln \dot{M}}{dt} \quad (45)$$

Esta equação permite estimar o valor de R_t em função do tempo, desde que se admita um valor para k_2 . Como exemplos, nas Figuras 12-14 e 15-18 apresentam-se os valores de \dot{M} [22] e de R_t para Portugal, Itália e EUA.

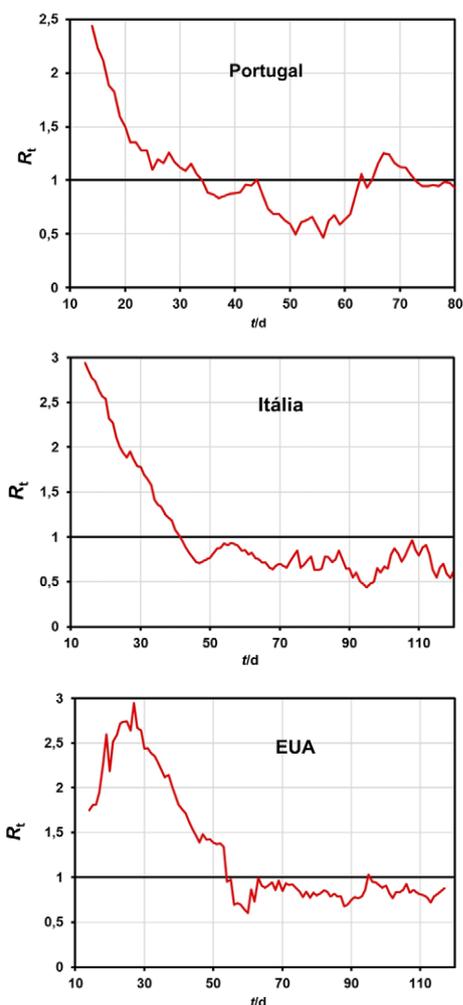
Os valores de R_t calculados para Portugal podem ser comparados com os dados pelo INSA, estimados com um modelo mais elaborado [25].



Figuras 12-14 - Número diário de mortes por COVID-19 [22], $\dot{M} = dM/dt$, para Portugal, Itália e EUA, sendo o último ponto correspondente ao dia 25 de junho de 2020. Apresentam-se médias móveis de 7 dias.

Verifica-se, nos três casos, que o R_t inicial (antes de medidas de contenção) está próximo do valor referido em vários estudos. Note-se que a variação de k_2 leva a uma compressão ou dilatação vertical da curva R_t (sempre em relação a 1), mas não altera o

andamento geral, que é, provavelmente, o resultado mais interessante da representação, pois traduz a variação da mortalidade, em termos relativos (\ddot{M}/\dot{M}) . De notar que, em todos estes casos, a fração de população infetada ou que já esteve infetada $(1-S/S_0)$ estará, muito aproximadamente, entre 2% (Portugal) e 6% (Itália) (sendo a letalidade da doença da ordem de 1% [23], o número é de cerca de 100 vezes o número total de óbitos - contudo há diferenças, dependendo, por exemplo, da estrutura etária de cada país e do nível dos cuidados de saúde). As variações observadas de R_t ao longo do tempo resultam principalmente de mudanças em k_1 (uma vez que S pouco variou), em consequência de medidas quer de contenção (diminuição), quer de desconfinamento (aumento). O regresso ao estilo de vida anterior à pandemia levaria também a um regresso ao R_0 inicial (cerca de 2,5).



Figuras 15-17 - Parâmetro R_t calculado com a eq. 45 para Portugal, Itália e EUA, sendo o último ponto correspondente ao dia 5 de junho (Portugal, último dia com $\dot{M} \geq 10$ pessoas/d) e 25 de junho de 2020 (Itália e EUA). Usa-se um tempo médio de recuperação $1/k_2 = 7$ dias e médias móveis de 7 dias.

Como mencionado acima (v. Fig. 3 e respetiva discussão), a imunidade de grupo é, segundo o modelo SIR, atingida quando $S/S_0 = 1/R_0$. No caso da COVID-19, usando $R_0 = 2,5$, obtém-se 0,4, ou seja, 60% da população precisaria de já ter tido a doença. Certas estimativas usam um R_0 mais elevado (3,0), e chegam a 67% [26]. Qualquer destes valores é provavelmente um majorante da percentagem real, cujo valor exato, desconhecido, depende de vários fatores e variará de caso para caso. Num estudo teórico recente [27], em que se considera a heterogeneidade da população, aponta-se para um valor indicativo de 43%.

5. Conclusões

Existem muitos pontos de contacto entre a Cinética Química e a Dinâmica Epidemiológica. No que diz respeito à abordagem determinística, ficou aqui estabelecido que a autocatálise com inibição é matematicamente idêntica ao modelo epidemiológico SIR de Kermack-McKendrick. A autocatálise sem inibição, que possui solução analítica (a curva logística), e também tem aplicações em dinâmica populacional, é uma boa forma pedagógica de introduzir o problema. Após estabelecer a semelhança entre as duas áreas científicas, discutiu-se o modelo SIR de Kermack-McKendrick, que foi, por fim, ilustrado por aplicação a um caso concreto e simples de epidemia viral, citado em livros de texto, e que pode ser usado em sala de aula, como ponto de partida para se estudar variantes por efeito de alteração de parâmetros. Usaram-se também alguns resultados que foram aplicados a casos concretos da pandemia da COVID-19 em três países, salientando-se as aproximações feitas.

Do ponto de vista da analogia química estabelecida, há duas situações distintas. Na primeira, *caso passivo*, o sistema evolui de acordo com os parâmetros iniciais, até que a reação se completa (por esgotamento de infetantes) e não há qualquer intervenção. Trata-se de uma reação a temperatura constante, e o químico (epidemiologista) é apenas um observador interessado (ou o estudioso de um evento já ocorrido). Na segunda situação, *caso ativo*, há uma intervenção no decurso da reação. Com efeito, o controlo da constante de velocidade k_1 (medidas de contenção e desconfinamento) pode ser entendido como uma programação de temperatura, desde que se admita que o passo elementar $I \rightarrow R$ é essencialmente não ativado, isto é, independente da temperatura [24]. O valor “natural” de k_1 corresponderá, digamos, à temperatura ambiente, e o controlo de k_1 consiste em arrefecer e posteriormente reaquecer a mistura reacional, em grau e duração variáveis, por exemplo para manter o número de infetantes constante (estado estacionário). De facto, as medidas de contenção podem ser descritas como um “arrefecimento” - necessário - da população (e, colateralmente, da economia) pelo governo [28].

Considerando a atual situação, nacional e mundial, o paralelo aqui apresentado pode dar origem a discussões e a vários tipos de projetos pedagógicos e, ainda, contribuir para um melhor entendimento da situação e das incertezas associadas.

Agradecimentos

Trabalho desenvolvido no âmbito do projeto UIDB/04565/2020, Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), Portugal.

Referências

- [1] P. Gray, S. K. Scott, *Chemical Oscillations and Instabilities. Non-linear Chemical Kinetics*, Clarendon Press, Oxford, 1990.
- [2] R. Plasson, A. Brandenburg, L. Jullien, H. Bersini, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 8073–8085.
- [3] M. Garcia-Moreno, B. H. Havsteen, R. Vardn, H. Rix-Matzen, *Biochim. Biophys. Acta* **1080** (1991) 143–147.
- [4] Deduzida e assim designada por Verhulst (1838, 1845) no contexto de um modelo de crescimento populacional, veja-se J. S. Cramer, *Tinbergen Institute Working Paper No. 2002-119/4* (2002). doi.org/10.2139/ssrn.360300
- [5] S. Kingsland, *Quart. Rev. Biol.* **57** (1982) 29–52.
- [6] T. B. Robertson, *Arch. Entwicklmech. Organ.* **25** (1908) 581–614.
- [7] R. Pearl, L. J. Reed, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **6** (1920) 275–288.
- [8] Em Demografia, dá-se ao crescimento exponencial o nome de modelo maltusiano. A abordagem de Verhulst foi precisamente a de corrigir o resultado de Malthus, por inclusão na equação de evolução de um termo quadrático negativo (matematicamente equivalente à inclusão de S na eq. 3), veja-se [4].
- [9] A. G. McKendrick, M. K. Pai, *Proc. R. Soc. Edinb.* **31** (1911) 649–655.
- [10] A. L. Koch, *The Monod Model and Its Alternatives*, in A. L. Koch, J. A. Robinson, G. A. Milliken (eds.), *Mathematical Modelling in Microbial Ecology*, Springer, Boston, 1998.
- [11] W. O. Kermack, A. G. McKendrick, *Proc. R. Soc. Lond. A* **115** (1927) 700–721.
- [12] J. D. Murray, *Mathematical Biology*, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [13] D. J. Daley, J. Gani, *Epidemic Modelling: An Introduction*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [14] F. Brauer, C. Castillo-Chavez, Z. Feng, *Mathematical Models in Epidemiology*, Springer, New York, 2019.
- [15] A partir das eqs. 13 e 14, conclui-se imediatamente que $E = -dS/dt$ é a função impulso para os infetantes, que decaem como $f(t) = \exp(-t/\tau)$, eqs. 16 e 17, ou seja, $I = E \otimes f + I_0 f$, em que \otimes representa a convolução entre duas funções. Em condições supercríticas ($R_0 > 1$), e sendo $I_0 \ll S_0$, o segundo termo é desprezável.
- [16] P. van den Driessche, *Infect. Dis. Model.* **2** (2017) 288–303.
- [17] A. J. Kucharski, T. W. Russell, C. Diamond, Y. Liu, J. Edmunds, S. Funk, R. M. Eggo, *Lancet Infect. Dis.* **20** (2020) 553–558.
- [18] *Report of the WHO-China Joint Mission on Coronavirus Disease 2019 (COVID-19)*, WHO, 28 Feb. 2020. Neste relatório indicam-se 2 semanas como tempo médio de recuperação para os casos leves e de 3–6 semanas para os casos graves.
- [19] M. N. Berberan-Santos, submetido para publicação.
- [20] News and Views, *Brit. Med. J.* **1** (6112) (1978) 587.
- [21] M. Rozo, G. K. Gronvall, *mBio* **6** (2015) e01013–15.
- [22] <https://www.ecdc.europa.eu/en/geographical-distribution-2019-ncov-cases>
- [23] <https://www.worldometers.info/coronavirus/coronavirus-death-rate/>
- [24] Mantendo a analogia com uma reação influenciada pela difusão, a constante de velocidade do controlo por difusão é $k_d = 8RT/3\eta$, sendo R a constante dos gases perfeitos, T a temperatura e η a viscosidade, que também varia com T , em primeira aproximação de acordo com a equação de Andrade, $\eta = A \exp(E_a/RT)$. Mas as medidas de contenção também afetam p , por exemplo pelo uso de máscaras, distanciamento, etc.
- [25] <http://www.insa.min-saude.pt/category/areas-de-atuacao/epidemiologia/covid-19-curva-epidemic-a-e-parametros-de-transmissibilidade/>
- [26] H. E. Randolph, L. B. Barreiro, *Immunity* **52** (2020) 737–741.
- [27] T. Britton, F. Ball, P. Trapman, *Science* **10.1126/science.abc6810** (2020).
- [28] Veja-se, por exemplo, um estudo recente em que se utiliza um modelo SEIR para analisar vários cenários de desconfinamento: T. Rawson, T. Brewer, D. Veltcheva, C. Huntingford, M. B. Bonsall, *Front. Public Health* **8** (2020) 262.

>

Mário Berberan e Santos

Professor Catedrático de Química-Física, Materiais e Nanociências do Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa. Foi presidente da Sociedade Portuguesa de Química em 2010–13. Chemistry Europe Fellow (classe de 2018/19). Presidente do Conselho Coordenador do Colégio de Química da Universidade de Lisboa. A sua investigação incide principalmente sobre luminescência, incluindo processos de relaxação e aplicações como sensores e OLEDs. berberan@tecnico.ulisboa.pt ORCID.org/0000-0002-2946-1498.

O Sabão na Luta Contra o SARS-CoV-2: Uma Questão de Forças Intermoleculares

>
M. Soledade C. S. Santos

Soap in the fight against SARS-CoV-2: it's all about intermolecular forces. Soaps and SARS-CoV-2 virus envelope chemical composition are presented. The amphiphilic characteristics of detergents and viral envelope lipid components are responsible for the establishment of strong detergent-lipid intermolecular interactions that trigger the destruction of the viral envelope leading to inactivation of the virus. The concentrations of soap/alcohol necessary to ensure epidermis wettability are presented, since this process is cornerstone for an effective inactivation of SARS-CoV-2. Intermolecular interactions between amphiphilic molecules explain the efficiency and importance of regular hands and surfaces hygiene in the fight against the COVID-19 pandemic.

A composição química dos sabões e do envelope do vírus SARS-CoV-2 são apresentados. As características anfífilas dos componentes dos detergentes e dos lípidos do envelope viral são responsáveis pelo estabelecimento de fortes interações intermoleculares detergente-lípido que permitem a destruição do envelope viral levando à inativação do vírus. As concentrações de sabão/álcool necessárias para assegurar a molhabilidade da epiderme, por forma a permitir a completa remoção e inativação do SARS-CoV-2, são apresentadas. As interações intermoleculares entre moléculas anfífilas permitem explicar a importância e eficácia de uma higiene regular das mãos e superfícies no combate à pandemia de COVID-19.

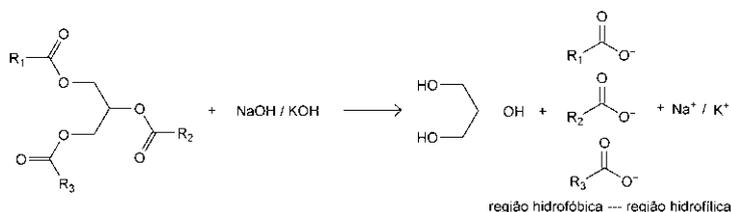
O velho sabão, conhecido desde a Antiguidade, e usado pelo Homem há mais de 4 mil anos, volta à ribalta no contexto da luta contra a pandemia da COVID-19 no séc. XXI. A lavagem regular das mãos com *sabão* está entre as principais medidas de prevenção da contaminação com o vírus SARS-CoV-2 preconizadas pela Organização Mundial de Saúde, OMS, (Figura 1) [1], mas porquê?

O *sabão*, obtido fervendo gorduras com cinzas, é conhecido desde 2800 a.C. na Mesopotâmia. Contudo, a designação de *sabão* está habitualmente associada às escorrências observadas no rio Tibre, após sacrifícios animais no Monte Sapo, cuja eficiência de lavagem foi reconhecida pelos Romanos. A saponificação de gorduras, esquematicamente apresentada na Figura 2, leva à formação de misturas de sais de ácidos gordos, que apresentam propriedades anfífilas (*gostam de ambos*: água e óleo) e cujas soluções aquosas têm capacidade de solubilização de gorduras.

Figura 1 - Infografia da OMS sobre a importância da lavagem das mãos no combate à doença.



Figura 2 - Esquema da saponificação de gorduras com formação de sabão: sais de ácidos gordos e glicerol.



Estas propriedades anfílicas estão na base da capacidade dos *sabões* para inativar os *Coronavírus*, como o SARS-CoV-2, por interações intermoleculares entre os compostos anfílicos do *sabão* e da camada externa dos vírus desta família.

Os vírus podem ser descritos, em termos muito simples, como nanopartículas de ácido nucleico, DNA ou RNA, contido num invólucro proteico denominado capsídeo. Os *Coronavírus*, responsáveis por infeções respiratórias no Homem, outros mamíferos e aves, têm cerca de 100 nm de diâmetro e o seu capsídeo está envolvido por uma bicamada lipídica que forma um *envelope* protetor adicional (Figuras 3,4) [2-4]. Este envelope lipídico auto-montado, é assegurado essencialmente por forças de dispersão entre fosfolípidos (anfílicos) e protege uma estrutura viral assente em interações intermoleculares fracas, mas é, também, um ponto de vulnerabilidade do SARS-CoV-2, perante outras moléculas anfílicas, como as constituintes dos sabões, géis de banho, detergentes de lavagem de roupa, loiça ou superfícies.

A composição química da vasta gama de produtos de higiene e limpeza é muito variada em termos dos tipos moléculas e proporções dos tensoativos, vulgo

Figura 3 - Imagem de microscopia eletrónica do vírus SARS-CoV-2 [3].

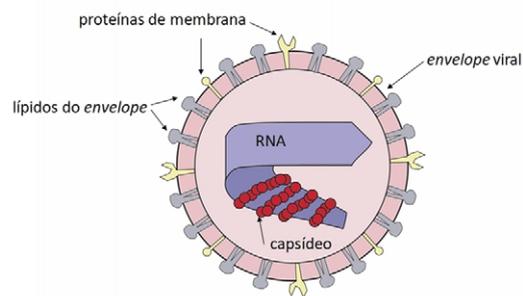
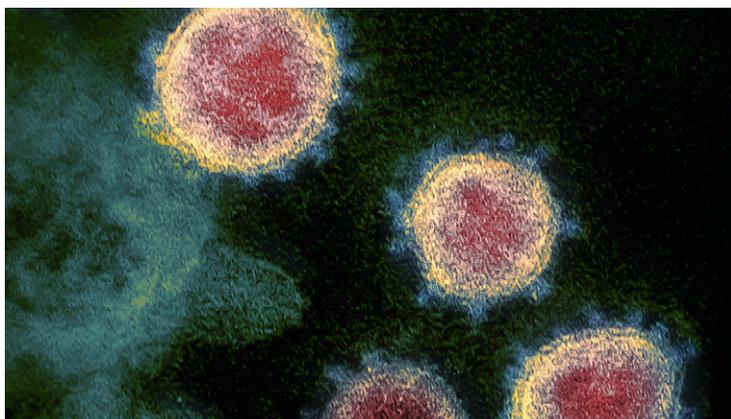


Figura 4 - Representação esquemática da estrutura do SARS-CoV-2 (adaptado de [4]).

detergentes, presentes nas diversas formulações. Independentemente da sua composição química específica, os produtos de higiene e limpeza são predominantemente constituídos por compostos anfílicos como o *sabão* (tensoativos iónicos e/ou não iónicos). A afinidade dos compostos anfílicos para a bicamada lipídica e o estabelecimento de ligações intermoleculares *detergente*-lípidos, levam à intercalação de moléculas de *detergente* na bicamada lipídica com a consequente destruição da integridade do envelope protetor, resultando na inativação do vírus (Figura 5). A nível molecular trata-se de um fenómeno idêntico à dissolução de gotículas de gordura em agregados moleculares de tensoativos, que explica o vulgar processo de lavagem [5,6].



Figura 5 - Esquema da solubilização do envelope viral do SARS-CoV-2, durante a lavagem das mãos.

Mas porquê 20 segundos de lavagem das mãos? É necessário garantir que toda a superfície cutânea é eficazmente molhada e ensaboada de forma a permitir a solubilização da bicamada lipídica do envelope viral. Este processo não é instantâneo, e é indispensável para assegurar a completa inativação e remoção do SARS-CoV-2. A epiderme, camada exterior da pele, protege o corpo das agressões externas, segregando lípidos e proteínas, e conferindo-lhe características de molhabilidade muito particulares. É hoje reconhecido que a pele tem características hidrofóbicas, sendo a hidrofobicidade cutânea dependente da zona do corpo, pelo que a avaliação de cosméticos e tratamentos dérmicos implica a determinação de tensões superficiais críticas de Zisman [6,7]. A tensão superficial crítica avalia o valor

mínimo que é necessário a tensão superficial da solução de lavagem atingir para assegurar o seu espalhamento sobre a superfície da pele. Este valor define assim qual a tensão superficial que toda e qualquer solução de higienização tem de ter para garantir que a pele é molhada por forma a permitir a remoção, ou mais corretamente, a inativação de vírus, bactérias ou outros contaminantes da nossa pele. O valor situa-se entre 24 e 27 mNm⁻¹ na região dos braços e mãos [7,8].

As soluções aquosas de sabão com concentrações inferiores a 10 mM atingem tensões superficiais desta ordem de grandeza, sendo, portanto, muito eficazes nos processos de lavagem. Os álcoois também são moléculas anfílicas tendo a capacidade de se introduzir entre os lípidos do envelope do SARS-CoV-2, contudo, a sua eficácia a baixas concentrações é mais reduzida pois para se atingirem tensões superficiais de 25 mNm⁻¹, a 25 °C, é necessário usar soluções aquosas de etanol a 70% ou de isopropanol a 40% [9] (Figura 6).

Figura 6 - Infografia da OMS sobre lavagem com sabão ou álcool.

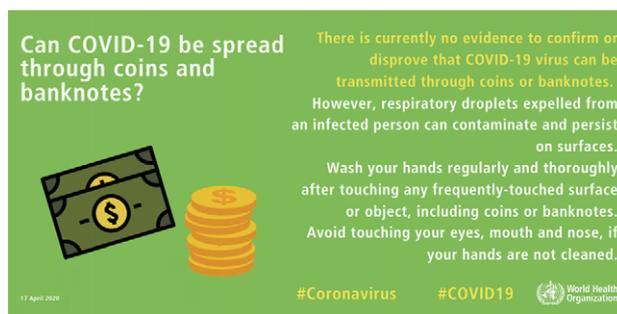


Figura 7 - Infografia da OMS sobre contaminação de superfícies.

Os estudos sobre o tempo de residência do SARS-CoV-2 em superfícies são escassos, refletem condições extremas de contaminação e são pouco representativos, devendo ser encarados como meramente indicativos (Figura 7). Os resultados apontam tempos de meia vida do vírus de 6 a 7 horas em materiais plásticos e aço inoxidável e inferiores a 4 horas em cartão [10]. Neste contexto, exceto para materiais muito hidrofóbicos como o Teflon, a limpeza regular de superfícies e vestuário com soluções aquosas de detergente asseguram a inativação do SARS-CoV-2. Assim, uma limpeza prévia de equipamentos de utilização comum com um papel embebido numa solução alcoólica de composição adequada, sempre que não é possível recorrer à lavagem clássica, é uma abordagem segura para uma utilização partilhada em espaços públicos como escolas, refeitórios, ginásios, ou salas de espetáculos.

Contudo, e independentemente da baixa absorção cutânea destes produtos de limpeza [8], convém ter presente que a aplicação frequente e continuada deste tipo de produtos pode levar a irritações/fissuras cutâneas, resultantes essencialmente da falta de lubrificação da epiderme, pelo que é recomendável acompanhar as lavagens frequentes com a aplicação regular de cremes hidratantes.

Referências

- [1] World Health Organization em <https://www.who.int/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019>, acessado em 21/04/2020.
- [2] S. M. Poutanen, 222 *Human Coronaviruses*, 1117-1120e4, in S. Long, L. K. Pickering and C. G. Prober (Ed.) *Principles and Practice of Pediatric Infectious Diseases, Part II Etiologic Agents of Infectious Diseases*, 4th Ed Saunders, 2012.
- [3] Image captured and colorized at NIAID's Rocky Mountain Laboratories (RML) in Hamilton, Montana, em <https://www.flickr.com/photos/niaid/49534865371/in/album-72157712914621487> (acessado em 09/06/2020).
- [4] B. Oberfeld, A. Achanta, K. Carpenter, P. Chen, N. M. Gillette, P. Langat, *Cellulose* (2020), disponível online: doi.org/10.1016/j.cell.2020.04.013.
- [5] J. Israelachvili, "Intermolecular and Surface forces", 2nd Ed, Academic Press, San Diego, EUA, 1998.
- [6] P. Reynolds, Wetting of Surfaces, 197-218, em T. Cosgrove (Ed.) *Colloid Science: Principles, Methods and Applications*, 2nd Ed John Wiley & Sons, Chichester, UK (2010).
- [7] A. El Khyat, A. Mavon, M. Leduc, P. Agache, P. Humbert, *Skin Research and Technology* 2 (1996) 91-96.
- [8] J. Krawczyk, *Skin Research and Technology* (2014) 1-10.
- [9] G. Vazquez, E. Alvarez, J. Navaza, *J. Chem. Eng. Data* 40 (1995) 611-614.
- [10] N. van Doremalen, T. Bushmaker, D. H. Morris, M. G. Holbrook, A. Gamble, B. N. Williamson, A. Tamin, J. L. Harcourt, N. J. Thornburg, S. I. Gerber, J. O. Lloyd-Smith, E. de Wit, V. J. Munster, *The N Engl. J. Med.* 382 (2020) 1564-1567.

>

Maria da Soledade C. S. Santos

Professora Auxiliar do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa coordenando, atualmente, o 1.º Ciclo em Química Tecnológica. Desenvolve investigação científica no Centro de Química Estrutural na área da Química-Física de soluções e sistemas coloidais. mssantos@ciencias.ulisboa.pt
ORCID.org/0000-0002-3269-1278.

Plástico na Era do Coronavírus: de Herói a Vilão, de Vilão a Coroado

> Maria Elvira Callapez

Plastic in the coronavirus era: from hero to villain, from villain to crowned. *Plastics are considered a symbol of technological progress and of industrial growth. They soon became products of great consumption, providing us with a more comfortable and safer lifestyle. Plastics are everywhere and although they offer great advantages, they are also environmentally persistent, which raised some problems. Most plastics used today are not biodegradable, a problem worsened by the fact of non-recycled plastics sent to landfills or simply disposed in the environment. With the outbreak of COVID-19, single-use plastics that, in recent years, have been the focus of environmental concerns, are now at the forefront of fighting this pandemic to prevent the spread of the SARS-CoV-2 virus. This essay gives visibility to plastics that re(assume) their functionality in a very significant contribution to the containment of the corona virus.*

Os plásticos, considerados um símbolo do progresso tecnológico e do crescimento da indústria, desde cedo se tornaram produtos de grande consumo, proporcionando-nos um estilo de vida mais confortável e seguro. Os plásticos estão por toda a parte e, embora ofereçam grandes vantagens, são também ambientalmente persistentes, o que tem levantado alguns problemas. A maioria dos plásticos usados atualmente não é biodegradável, um problema que é agravado pelo facto de alguns plásticos não serem reciclados, sendo em vez disso encaminhados para aterros sanitários ou simplesmente descartados no meio ambiente. Com o surto da COVID-19, os plásticos de utilização única que, nos últimos anos, têm estado na mira das preocupações ambientais, estão agora na linha de frente da luta contra essa pandemia para impedir a propagação do vírus SARS-CoV-2. Este ensaio dá visibilidade aos plásticos que re(assumem) a sua funcionalidade numa contribuição muito significativa para a contenção deste vírus.

Introdução

O plástico, o material que tanto fascinou o filósofo francês Roland Barthes (1915-1980), descrito no seu livro *Mythologies* em 1957, tornou-se involuntariamente um símbolo da crise da nossa sociedade pós-moderna e um dos maiores desafios do século XXI [1].

A palavra “Plástico” é usada, frequentemente, num contexto negativo. Tem havido uma retórica alarmista contra os plásticos, uma “PLASTICOFOBIA”. Notícias e manchetes sobre o efeito dos plásticos nas mudanças climáticas e dos micropásticos nos

oceanos e nos ambientes de águas superficiais, o seu impacto na vida marinha e humana, são ocorrências praticamente diárias nos meios de comunicação social. Imagens de animais marinhos enleados em resíduos de plástico, ilhas de plástico a flutuar nos oceanos e resíduos de plástico espalhados pelas nossas cidades, catalisaram a recente onda de mobilização emocional contra os plásticos.

Muito destes sentimentos resultam de alguma confusão entre o significado de poluição e de resíduos.

A maior parte da poluição é causada pela queima de combustíveis fósseis, como petróleo, carvão ou gás natural, o que aumenta a quantidade de dióxido de carbono na atmosfera e o consequente efeito de estufa. Os plásticos, por si, não poluem o meio ambiente, não são os causadores destes acontecimentos, que resultam da colocação do “lixo” plástico em lugares inapropriados, sem preocupações evidentes para uma seleção adequada dos materiais. Muito recentemente a Direção-Geral de Saúde (DGS) alertou para o cumprimento de regras de proteção ambiental, nomeadamente para a colocação das máscaras descartáveis e luvas, usadas no contexto da COVID-19, no lixo doméstico e não no ecoponto, e nunca na via pública, como é comumente observado atualmente, local totalmente inadequado ao seu destino final (Figura 1).

Figura 1 - Máscaras e luvas na via pública.
Crédito Paulo J. Mendes, 2020, Lisboa



É importante um consumo responsável para que a utilização dos plásticos se justifique e evitar que os oceanos, por exemplo, recebam estes materiais como resíduos. Para os movimentos “anti-plástico”, estes materiais, nomeadamente os sacos de plástico, são perigosos e desagradáveis além de constituírem uma ameaça ambiental. Todavia não são eles os culpados por esgotos entupidos, rios e animais marinhos asfixiados ou pelo aquecimento global. Em vez disso, são provavelmente a nossa melhor aposta para transportar todo o nosso lixo de forma consciente. O plástico tem um papel muito significativo na redução das mudanças climáticas, conforme facilmente se evidencia, pois economiza energia, reduz emissões de CO₂, e conserva recursos, entre outros fatores. É vital para a indústria alimentar, promovendo a sua sustentabilidade, contribuindo para a redução do desperdício de alimentos, aumentando a vida útil dos produtos e evitando a deterioração dos mesmos. No sector dos transportes, os plásticos, menos densos

que os materiais convencionais, diminuem o peso dos veículos (carros, camiões, aviões, barcos,...) e consequentemente o consumo de combustível. Representam aproximadamente 60% dos materiais utilizados no fabrico de têxteis, um total de mais de 70 milhões de toneladas de plástico produzido anualmente, o que reduz a necessidade de fibras naturais, como algodão ou lã, que exigem grandes áreas de terra produtiva e de água. Estes materiais são fundamentais nos equipamentos de produção de energia renovável, como são exemplos as pás de turbinas eólicas, pás de moinhos de maré e tanques de biogás [2].

Os plásticos, materiais especiais, símbolos da modernidade, entraram definitivamente nas nossas vidas porque se impuseram pelas suas propriedades únicas: são baratos, leves, duráveis, resistentes à corrosão, bons isoladores térmicos e elétricos, versáteis, feitos por medida. São tecnicamente sofisticados e aplicam-se em quase todos os sectores da nossa sociedade: medicina, eletrónica, aeronáutica, indústria automóvel, telecomunicações, construção, alimentação, vestuário, calçado, entre outras.

Os plásticos são polímeros [3], (mas nem todos os polímeros são plásticos), macromoléculas [4], de elevado peso molecular, constituídos a partir de moléculas menores, os monómeros, que estabelecem ligações químicas entre si, através de reações de condensação ou de polimerização de adição. Os plásticos incluem-se na classe de polímeros sintéticos que passam pelo estado plástico, ou seja, um estado moldável entre o estado líquido e o estado sólido, a uma temperatura superior à temperatura ambiente (considerar pressão e temperaturas normais, PTN). Estes materiais deformam-se sob a ação da temperatura e de uma força exterior e conservam essa deformação depois destes agentes deixarem de atuar.

Com base nas características químicas, nomeadamente, a estrutura e as forças intermoleculares envolvidas, distinguem-se dois grupos de plásticos: os termoplásticos e os termoendurecíveis, termoestáveis ou termofixos, ainda que esta classificação levante problemas [5], dado que pode abranger uma gama de polímeros mais ou menos extensa e diversificada. Quando os plásticos se formam, as suas moléculas emaranham-se como “espaguete” e a sua resistência mecânica depende muito da forma como as moléculas estão interligadas. Assim, os termoplásticos são polímeros de peso molecular muito elevado, flexíveis a temperaturas elevadas [6-8]. Por conseguinte, podem ser moldados plasticamente tantas vezes quantas necessárias, voltando ao estado sólido depois de arrefecidos. Neste tipo de plásticos existem ligações covalentes intensas entre os átomos de cada cadeia, mas as forças entre as cadeias emaranhadas são fracas, permitindo que estas se movam facilmente

umas sobre as outras. É esta estrutura que lhes confere as propriedades atrás referidas (Figuras 2 e 3). São exemplos de termoplásticos o polietileno (PE), o poliestireno (PS), o polipropileno (PP), o policloreto de vinilo (PVC), os acrílicos e o «nylon».

Figura 2 - Representação dos termoplásticos.

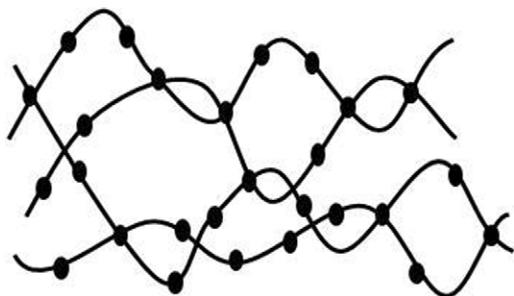
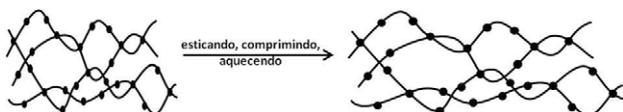


Figura 3 - Representação da deformação dos termoplásticos.



Os polímeros termoendurecíveis tornam-se rígidos durante o seu processo de fabrico e moldagem a quente. Solidificam formando um corpo sólido muito estável, o que impede o reprocessamento inverso para posterior reutilização. Portanto, não podem ser novamente transformados, i. e., amolecidos e moldados. Na sua forma original são rígidos e decompõem-se ao serem aquecidos acima de uma determinada temperatura. Nos polímeros com esta designação existem ligações covalentes intensas entre os átomos de cada cadeia e entre as próprias cadeias. Por isso elas não se movem umas relativamente às outras quando aquecidas (Figuras 4 e 5). São exemplos destes polímeros termoendurecíveis a «baquelite», a

Figura 4- Representação dos polímeros termoendurecíveis.



Figura 5 - Representação dos polímeros termoendurecíveis sob ações mecânicas e térmicas.



resina ureia-formaldeído, as resinas epóxi, a borracha vulcanizada e alguns poliuretanos.

Há ainda outro tipo de polímeros com bastante elasticidade que se denominam por elastómeros. Têm a característica de se alongarem várias vezes, quando submetidos a uma força mecânica, e de voltarem à sua forma inicial quando esta força deixa de atuar. São exemplos de elastómeros as borrachas (Figura 6).



Figura 6 - Representação dos elastómeros.

A diversidade de polímeros e a versatilidade das suas propriedades mecânicas e térmicas facilitam a produção de uma vasta gama de produtos de plástico que trazem avanços tecnológicos, economia de energia e inúmeros outros benefícios sociais. É um dos materiais mais utilizados no mundo, adequados a um amplo espectro de usos. São vistos como um material milagroso, exemplo excepcional de engenharia, assumindo o *status* único de um material indispensável para o estilo de vida moderno. De facto, os plásticos conquistaram o planeta e o seu uso é inevitável no nosso quotidiano (Figura 7).

Figura 7 - Plásticos do quotidiano. Crédito: M.E. Callapez, 2019, Berkeley (Esq.); 2020, Lisboa, coleção M.E. Callapez (Dir.)



O “plástico” acaba por ser vítima do seu próprio sucesso, o herói de ontem, o vilão de hoje. Mas, parece que por ironia, em algumas semanas, a imagem do plástico volta a ser positiva e a indústria química associada ao fabrico destes materiais “respira” com alívio do cenário que viria a ser o seu *annus horribilis* em virtude do início da proibição dos plásticos de uso único. Tal mudança deve-se à chegada do coronavírus que se espalhou por todo o mundo em 2020.

Os plásticos e a COVID-19

A doença COVID-19, causada pelo vírus SARS-CoV-2, surgiu no final de 2019 e em seis meses já infetou mais de oito milhões e meio de pessoas e matou mais do que quatrocentas e cinquenta mil (infetados: 8509393 e mortes: 454380) [9]. A doença propaga-se de pessoa para pessoa, pelo ar, através de gotículas projetadas da boca ou do nariz quando a pessoa infetada tosse ou espirra, podendo outra ser infetada se inalar essas gotículas ou se tocar em superfícies contaminadas.

A crise da COVID-19 tem destacado o papel essencial dos plásticos, sendo um dos efeitos da pandemia a procura acentuada por estes produtos em defesa do público em geral, pacientes, profissionais de saúde e serviços [10]. De facto, os plásticos têm estado na linha de frente na luta contra a pandemia da COVID-19, desempenhando um papel fundamental na assistência médica para a prevenção da doença. Têm cada vez mais procura os equipamentos de proteção individual (EPI's) de uso único, tais como máscaras, batas, óculos, luvas, botas, seringas, tubos intravenosos, zaragatoas, cateteres, fabricados com diferentes polímeros usados por equipas médicas e enfermeiros para evitar a disseminação e infeção por bactérias e vírus mortais e reduzir o risco dos pacientes [11]. É ainda importante referir que todos estes equipamentos de proteção individual e utensílios auxiliares de diagnóstico são igualmente responsáveis por uma grande quantidade de resíduos, infelizmente nem sempre com o destino final adequado, como se referiu acima.

Um dos EPI's em destaque e fundamental nesta pandemia é a máscara para evitar contacto entre o ar que se respira e a boca e o nariz. Uma máscara cirúrgica é constituída por tecido não tecido (TNT), que possui melhor capacidade de filtração e de permeabilidade ao ar, permanecendo menos escorregadio que o tecido. O material mais usado é o polipropileno, com 20 ou 25 gramas por metro quadrado (g/m^2) de densidade. As máscaras também podem ser feitas de poliestireno, policarbonato, polietileno ou poliéster.

No meio da crise da COVID-19, é difícil evitar os plásticos descartáveis tendo em conta os seus benefícios para a saúde, higiene e segurança. Mas é

importante mudar os maus costumes e até mudar a maneira como nos referimos aos produtos de uso único. Com efeito “As pessoas não devem dizer “produto plástico descartável” porque nada é descartável (...) não devem dizer “uso único” porque devemos-nos esforçar para usar tudo muitas vezes” [12]. Na realidade, alguns destes plásticos têm ciclos de vida útil, renováveis através de processos de reciclagem. Todavia, nesta gama de recicláveis, há que realçar que há produtos, como por exemplo as zaragatoas, que num ciclo de vida serão sempre de “uso único”.

A escassez de EPI's, em muitos países, inspirou o recurso a modelos com artigos domésticos, como um saco plástico transparente colocado em volta das cabeças dos profissionais com um selo hermético ao redor do pescoço para proteção contra gotículas durante a intubação endotraqueal, em vez de óculos de proteção e máscara [13]. Neste caso, e se for utilizada esta proteção durante um longo período, estará em causa a própria vida do profissional de saúde uma vez que haverá um excesso de CO_2 dentro do saco plástico. Uma seleção apropriada dos materiais constituintes das proteções individuais começa nos fabricantes com prioridade ao efeito protetor e ao tempo de utilização, mas com uma visão estratégica muito forte na reciclagem dos materiais envolvidos. No mundo dos polímeros há sem dúvida uma enorme versatilidade de possibilidades que, combinadas, possibilitem o fabrico de plásticos maioritariamente recicláveis. É aqui que reside a responsabilidade dos produtores a nível mundial num objetivo comum de diminuição e eliminação de resíduos desta natureza.

O coronavírus tem provocado debates sobre as embalagens de alimentos, onde alguns defendem que o plástico é vital para resguardo dos alimentos de germes e prolongamento da sua vida útil, enquanto outros salientam que a pandemia revela que o plástico descartável é insustentável e portador de substâncias nocivas e bactérias. Do ponto de vista da sustentabilidade, as embalagens plásticas superam as alternativas conforme têm provado vários estudos [14].

Na última década, as proibições de sacos de plásticos foram impostas em vários países. Mas agora, devido à pandemia de coronavírus, esses esforços de redução de plástico foram temporariamente suspensos devido a preocupações crescentes com a saúde. Embora se saiba que o coronavírus é transmitido principalmente por meio de interações pessoa a pessoa, não há certezas sobre se as embalagens podem transmitir a doença [15]. Em alguns países em vias de desenvolvimento, os sacos de plásticos servem de medida preventiva contra a propagação do novo coronavírus, como retrata a imagem de um homem que cobre as mãos com sacos de plástico, em Caracas (Figura 8).



Figura 8 - Um homem cobre as mãos com sacos de plástico como medida preventiva contra a propagação do novo coronavírus, COVID-19, Caracas. Fotografia tirada em 20 de março de 2020 [16].

Conclusões

Com o aumento do uso de materiais plásticos no sector de saúde, seria recomendável que os consumidores, os governos e os reguladores e a indústria de plásticos se comprometessem a conviver com políticas e práticas corretas de recolha destes resíduos e que a reciclagem fosse um objetivo prioritário a fim de evitar a contaminação e a propagação da infeção por COVID-19 em benefício do planeta e das vidas humanas em perigo com esta doença.

No contexto da crise da pandemia em que vivemos, a higiene e a saúde do consumidor são uma prioridade pelo que o uso correto dos plásticos de uso único é crucial uma vez que, até ao momento, não há material alternativo comprovado e competitivo que supere os plásticos, os quais garantem a segurança e a limitação da contaminação.

O plástico é importante para o desenvolvimento sustentável e possui propriedades funcionais únicas que outros materiais não possuem. Em vez de bani-los, seria bom usá-los com responsabilidade, onde forem indispensáveis. A resposta que o plástico tem dado à crise do coronavírus, ao contribuir para a mitigação desta doença grave e contagiosa constitui, sem dúvida, um bom exemplo. Mas serão oportunas algumas questões: em tempos de pandemia pela COVID-19 o que seria do nosso planeta sem plásticos? Qual é a pegada de carbono correspondente ao fabrico destes plásticos? E quando será possível avaliar os resíduos de plásticos provenientes do combate e precaução a esta doença?

Agradecimentos

A autora agradece à equipa editorial do QUÍMICA os pertinentes comentários, sugestões e revisão do texto.

Referências

- [1] R. Barthes, "Mythologies", Éditions du Seuil, *Manchecourt*, 1957.
- [2] Disposable or single-use plastics? Neither! Recyclable or reusable plastics: www.expresspolymlett.com; <https://doi.org/10.3144/expresspolymlett.2020.1> (acedido em 19/05/2020)
- [3] Polímero deriva das palavras gregas poli, que significa muitos, e meros, que significa unidades.
- [4] Para uma discussão mais pormenorizada sobre nomenclatura de polímeros, ver: IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **84** (2012) 2167-2169.
- [5] H. A. Witcoff, B. G. Reuben, "Industrial Organic Chemicals in Perspective, Part Two: Technology, Formulation, and Use", John Wiley & Sons, Nova Iorque/Chichester/Brisbane/Toronto, 1980.
- [6] P.F. Mastro, "Plastics Product Design", Scrivener Publishing LLC., John Wiley & Sons, New Jersey, 2016.
- [7] Understanding Plastics and Polymers - The Different Types of Plastic: <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=17477> (acedido em 20/05/2020)
- [8] Polymers and Plastics: <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=13567> (acedido em 14/05/2020)
- [9] Johns Hopkins University, Coronavirus Resource Center: <https://coronavirus.jhu.edu/> (acedido em 19/06/2020).
- [10] J. J. Klemes, Y. V. Fan, R. R. Tan, P. Jiang, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **127** (2020) 1-7.
- [11] Plastics Had Been Falling Out of Favor. Then Came the Virus: <https://www.bloomberg.com/news/articles/2020-03-15/plastics-had-been-falling-out-of-favor-then-came-coronavirus> (acedido em 16/03/2020).
- [12] Op. cit. [2].
- [13] E. Lee, W. Loh, I. Ang, Y. Tan, *J Emerg Med.* **58** (2020) 821-823.
- [14] P. R. Samanta, R. Gupta, R. Gupta, S. Chauhan, A. Johri, *Ink World* **26** (2020) 39-41.
- [15] COVID-19 Sparks a Return of Plastic Bags: <https://www.waste360.com/plastics/covid-19-sparks-return-plastic-bags> (acedido em 17/05/2020).
- [16] Colby Cosh on COVID-19: How long before plastic bag haters feel safe to resume their crusade? <https://nationalpost.com/opinion/colby-cosh-on-covid-19-how-long-before-plastic-bag-haters-feel-safe-to-resume-their-crusade> (acedido em 15/05/2020).

>

Maria Elvira Callapez

É membro investigador no Centro Interuniversitário de História da Ciência e Tecnologia-Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa. Investigadora principal do projecto "O Triunfo da Baquelite - Contributos para uma História dos Plásticos em Portugal", ganhou em

2019 o Dibner Award for Excellence in Museum Exhibits, atribuído pela Society for the History of Technology (SHOT) pela exposição "Plasticidade - Uma História dos Plásticos em Portugal".
mecallapez@fc.ul.pt
ORCID.org/0000-0003-2461-363X.

Micro-Ondas: Nova Abordagem na Síntese de Redes Metal-Orgânicas

>
Ricardo F. Mendes*
Filipe A. Almeida Paz

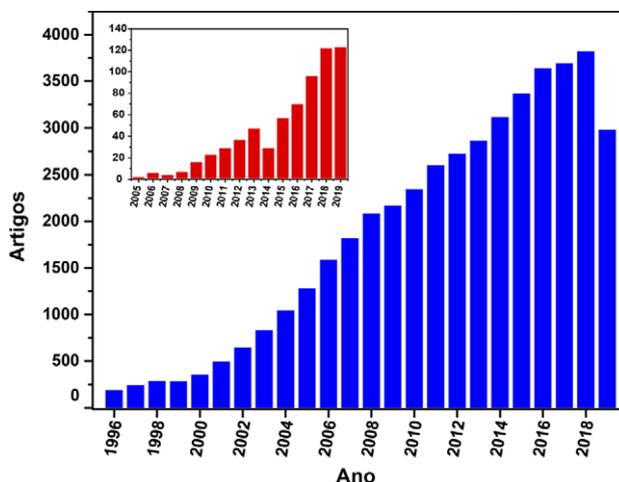
Microwave: A new approach for Metal-Organic Framework synthesis. *This article presents, in a simple way, the use of microwaves in chemical synthesis. The advantages of this method are enumerated and compared to those of conventional heating with some examples being discussed. The use of this approach in the preparation of Metal-Organic Frameworks (MOF) is presented in more detail, showing the advantages of this method not only in the synthesis of MOFs but also its great potential for the modification and processing of these materials.*

Este artigo apresenta, de uma forma resumida, o uso de micro-ondas em síntese química. Enumera as vantagens face ao aquecimento convencional apresentando alguns exemplos práticos. O uso desta abordagem na preparação de Redes Metal-Orgânicas (ou MOFs do Inglês) é apresentado em maior detalhe, mostrando as vantagens deste método não só na síntese de MOFs como também o seu grande potencial na modificação e processamento destes compostos em materiais.

1. Introdução

As fontes de calor usadas em síntese química têm vindo a ser melhoradas ao longo do último século. Desde a invenção do bico de Bunsen em 1855, novas fontes foram desenvolvidas permitindo fazer sínteses mais ambiciosas de forma mais controlada e segura (como, por exemplo, banhos de óleo e placas de aquecimento). Avanços tecnológicos abriram, entretanto, a possibilidade da utilização de outras formas de aquecimento. Entre estas, o uso de micro-ondas generalizou-se de forma muito rápida, primeiro no ambiente doméstico e, nas últimas décadas, em ambiente laboratorial. Desde o seu primeiro uso doméstico em 1947, o aquecimento por micro-ondas em síntese química transitou de uma mera curiosidade para um uso generalizado ao nível da investigação académica (com aumento significativo na última década – Figura 1) [1-3]. A sua utilização a nível industrial é, no entanto, muito mais limitada.

Figura 1 – Número de publicações indicando síntese genérica por micro-ondas (a azul) e, em particular, a de Redes Metal-Orgânicas, ou MOFs do Inglês (a vermelho) [4].



1.1. O que são micro-ondas?

Micro-ondas são uma forma de radiação eletromagnética com comprimento de onda entre 1 m e 1 mm ou, em termos de frequência, entre 300 MHz e 300 GHz, sendo o uso mais comum em transmissão de TV através de satélites e sistemas de radar. As micro-ondas possuem uma energia muito inferior à energia necessária para quebrar ligações químicas, o que as torna ideais como fonte de aquecimento sem alterar a estrutura química das moléculas.

1.2. Aquecimento por micro-ondas

As micro-ondas têm sido utilizadas em investigação química e biomédica, particularmente como uma forma de aquecimento. Este fenómeno foi descoberto acidentalmente em 1946 por Percy Spencer, quando um chocolate que se encontrava no seu bolso derreteu enquanto realizava uma experiência com um magnetrão. Desde então verificou-se que as micro-ondas tinham a capacidade de aumentar a temperatura interna da comida de uma forma muito mais rápida do que um forno convencional, o que levou à introdução do primeiro micro-ondas comercial para uso doméstico em 1954. No entanto, só após o trabalho realizado por Gedye e colaboradores em 1986 é que o uso de micro-ondas se tornou uma tecnologia emergente e interessante no ramo de síntese química [5]. Com o aumento do interesse neste tipo de síntese, novas tecnologias foram desenvolvidas. Os micro-ondas domésticos convencionais não são adequados para serem usados em síntese química, uma vez que as micro-ondas geradas irão formar bolsas de alta e baixa energia no interior do equipamento, comprometendo a reprodutibilidade. Além disso, estes equipamentos domésticos não são equipados com sensores de temperatura e não são construídos para usarem solventes orgânicos perigosos e inflamáveis com segurança. Por estes motivos, foram desenvolvidos micro-ondas específicos para uso científico, capazes de resistir a explosões do vaso de reação, bem como para controlar a temperatura, pressão e velocidade de agitação da reação de forma bastante precisa (Figura 2). Até a data existem várias empresas que comercializam este tipo de equipamentos. Para uma descrição mais detalhada, o leitor é direcionado para os sites dos fabricantes: Anton Paar (<http://www.anton-paar.com>), Biotage (<http://www.biotage.com>), CEM Corporation (<http://www.cem.com>) e Milestone (<http://www.milestonesrl.com>).

1.2.1. Aquecimento convencional vs. aquecimento por micro-ondas

Mas o que torna, afinal, a síntese por micro-ondas tão interessante em investigação? De uma forma geral, no aquecimento convencional (como no caso de aquecimento com banho de óleo), o vaso reacional

é aquecido “*de fora para dentro*”. A temperatura interna é geralmente mais baixa que no seu exterior, dando origem a um gradiente de temperatura. Embora a agitação do vaso reacional possa minimizar este problema, o equilíbrio térmico pode demorar algum tempo até ser atingido. O uso de micro-ondas, por outro lado, não possui esta limitação pois a radiação interage diretamente com as moléculas do solvente, levando a um aumento de temperatura localizado ao longo de todo o vaso reacional. Do mesmo modo, este aumento de temperatura é mais rápido do que por aquecimento convencional. Por estas razões, o uso de micro-ondas em comparação com o aquecimento convencional possui grandes vantagens:

- i) Aquecimento uniforme de todo o conteúdo do vaso reacional;
- ii) A velocidade do processo de aquecimento é aumentada (diminuição considerável do tempo de reação);
- iii) Alta eficiência de aquecimento (diminuição do custo);
- iv) Redução de reações secundárias;
- v) Maior pureza do produto final;
- vi) Maior reprodutibilidade.



Figura 2 – Micro-ondas de pequena escala usados em investigação comercializados pela (a) CEM, (b) Anton Parr e (c) Milestone.

2. Micro-ondas em síntese

A síntese de compostos orgânicos e o desenvolvimento de novos mecanismos continua a ser um dos objetivos da comunidade científica, especialmente no âmbito da indústria farmacêutica [6,7]. Deste modo, novos métodos que permitam obter compostos sem reações secundárias e com métodos de purificação simples e em tempo reduzido continuam a ser objeto de grande interesse. Não é, por isso, de surpreender que esta seja a área da Química que mais lucrou com o desenvolvimento da síntese por micro-ondas. A simplicidade operacional dos equipamentos, aliada com a maior rapidez de síntese, permite ao investigador fazer um “*screening*” de várias reações num curto espaço de tempo. Uma outra importante vantagem do uso de micro-ondas em química orgânica prende-se com a escolha do solvente. Um químico orgânico

geralmente escolhe um solvente de acordo com o seu ponto de ebulição: xilenos (p.e. 137-140 °C) ou mesmo a *N*-metil-2-pirrolidona (p.e. 202 °C) são usados em reações que necessitem de temperaturas mais elevadas. Recorrendo a síntese por micro-ondas em vaso fechado, virtualmente qualquer solvente pode ser usado (por exemplo, etanol ou acetonitrilo podem substituir a *N*-metil-2-pirrolidona). Existem muito poucas limitações ao tipo de química orgânica possível de ser realizada com auxílio desta forma de aquecimento. Não é, então, surpreendente que a síntese por micro-ondas seja usada num grande número de reações orgânicas desde a síntese de *N*-heterociclos [8], reações de acoplamento cruzado [9], cicloadições [10], reações de hidratação de nitrilo [11], entre muitas outras.

Uma vertente da síntese orgânica é sem dúvida a preparação de novos compostos com potencial aplicação na medicina. A síntese por micro-ondas de muitos destes compostos constituiu uma grande vantagem para as empresas farmacêuticas [12, 13]. Com o aumento dos custos de investigação e desenvolvimento, e com a diminuição do número de medicamentos aprovados (com medidas cada vez mais apertadas, em especial no caso da FDA), a obtenção de novos medicamentos com custo reduzido tornou-se uma prioridade. A diminuição do tempo de reação permitiu acelerar não só a preparação de grandes quantidades de medicamentos como também aumentar a produtividade durante o processo de investigação. Em muitos casos, o uso de micro-ondas permitiu testar rotas de síntese que até então os métodos clássicos não o permitiam.

A aplicação de radiação de micro-ondas na síntese inorgânica teve um grande impacto na preparação de nanomateriais, uma vez que as propriedades destes materiais podem ser modeladas através da variação do tamanho e morfologia das partículas. Partículas com morfologias do tipo esferas, cilindros, triângulos e cubos podem ser obtidas alterando apenas, e em muitos casos, a concentração dos reagentes e/ou temperatura de reação. Como exemplo, Kundu *et al.* conseguiram obter nanopartículas de ouro com diferentes tamanhos e morfologias em apenas 90 s de reação, alterando apenas a razão de concentração dos precursores usados (Figura 3) [14]. Tamanhos das partículas podem ser controlados desde centenas de micrómetros até poucos nanómetros, com pequenas distribuições de tamanho. A utilização deste género de aquecimento permitiu fazer um *screening* de várias condições experimentais, derivando condições ideais de, por exemplo, diferentes fases cristalinas. Até à data, a síntese por micro-ondas foi utilizada para a preparação de óxidos metálicos, fosfatos metálicos, zeólitos, entre outros compósitos [15].

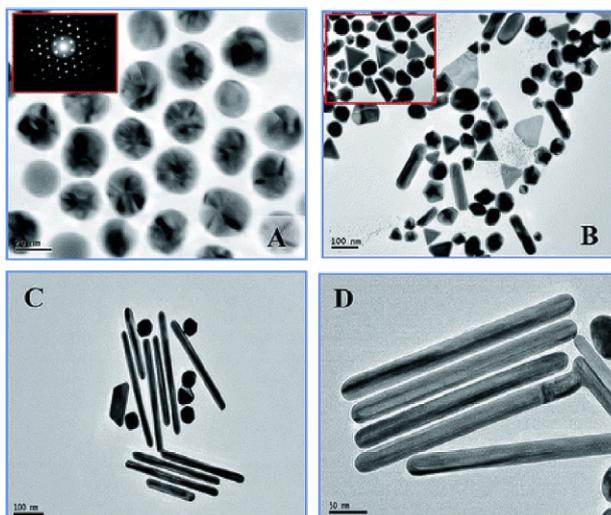


Figura 3 – Imagens de TEM de diferentes nanopartículas de ouro sintetizadas após 90 s de reação. (A) nanopartículas esféricas de ouro; (B) imagens das nanopartículas de ouro com mistura de diferentes formas; C e D mostram as imagens de nanocilindros de ouro em diferentes ampliações. Reproduzido com permissão da referência [14].

3. Síntese de Redes Metal-Orgânicas (MOFs)

3.1. O que são MOFs

Redes Metal-Orgânicas são uma classe de materiais cristalinos de grande importância na área de ciência dos materiais, evidenciados pelo grande número (e diversidade) de estruturas e aplicações para estes materiais. O termo Redes Metal-Orgânicas (MOFs, do inglês Metal-Organic Frameworks) foi introduzido pela primeira vez em 1995 por Omar Yaghi e Hailian Li quando descreveram uma estrutura com grandes canais retangulares, $[\text{Cu}(4,4'\text{-bpy})_{1,5}]\cdot\text{NO}_3\cdot 1,25\text{H}_2\text{O}$ [16]. MOFs são redes de coordenação construídas pela “*automontagem*” de iões metálicos (desde metais alcalinos a metais de transição e lantanídeos) com uma grande diversidade de moléculas orgânicas (apresentando diferentes grupos funcionais como ácidos carboxílicos, fosfónicos ou mesmo sulfónicos), através de ligações covalentes fortes e interações intermoleculares. Dependendo das condições experimentais usadas, estes materiais podem apresentar diferentes dimensionalidades, desde cadeias 1D, camadas 2D ou redes 3D (Figura 4). Embora as investigações iniciais desses materiais se tenham baseado no conhecimento acumulado pela química de zeólitos, a sua síntese trouxe mais uma importante vantagem: a possibilidade de desenhar e controlar o tamanho dos poros (Figura 5). Ao seleccionar diferentes moléculas orgânicas (também denominados por espaçadores), pode-se virtualmente construir materiais com diferentes formas, tamanhos

e ambientes químicos (por funcionalização do ligando orgânico). Estas redes são também mais flexíveis quando comparadas com as dos zeólitos, permitindo uma modificação estrutural por troca de hóspedes ou reações químicas sem perda de cristalinidade.

Diferentes métodos de síntese têm sido utilizados nas últimas décadas para a preparação de MOFs (difusão lenta, reação em vaso aberto, eletroquímica, etc.) sendo o mais usual a síntese hidrotérmica, em que a reação é feita dentro de autoclaves aquecidos com auxílio de um forno. No entanto, com o crescente interesse em MOFs funcionais, e com a investigação a ser

mais direcionada para a indústria em prejuízo da investigação mais puramente académica, o desenvolvimento de novas técnicas na preparação destes materiais é fundamental. A grande maioria dos materiais descritos na literatura são sintetizados com auxílio de métodos que necessitam de tempos de reação longos (*e.g.* até vários dias) e de grandes equipamentos (como por exemplo, fornos). Isto leva a um consumo de energia elevado, tornando estes materiais pouco apetecíveis em termos industriais. O uso de micro-ondas permite reduzir este custo, proporcionando uma redução considerável no tempo de reação (em alguns casos para apenas alguns segundos), e sem uso de grandes quantidades de solventes e, inclusive, a utilização de apenas água como meio reacional.

3.2. Uso de micro-ondas em MOFs

Uma das grandes vantagens do uso de micro-ondas na preparação de MOFs em comparação com métodos clássicos é a diminuição considerável do tempo de reação já que o processo promove a nucleação de cristais em detrimento do processo de crescimento dos mesmos. O primeiro MOF sintetizado com o auxílio de micro-ondas foi reportado por Jhung *et al.*, conhecido como MIL-100 (MIL significa *Materials of Institute Lavoisier*) [17]. Inicialmente este material era sintetizado com auxílio de um forno (método denominado por hidrotérmico), a 220°C por um período de 4 dias. Recorrendo à síntese por micro-ondas o mesmo material pode ser preparado em apenas 4 horas, mantendo o rendimento. Vários autores reportam a mesma tendência, com tempos de reação a diminuírem de semanas para horas, ou mesmo minutos. Este favorecimento do processo de nucleação em detrimento do crescimento promove não só uma redução do tempo de reação, mas também do tamanho dos cristais obtidos. Com um controlo das condições experimentais, é possível ajustar o tamanho de partículas do micro para o nanométrico.

Vários materiais bem conhecidos foram preparados usando esta metodologia (Tabela 1). Inicialmente, este método foi utilizado como uma alternativa para a preparação de MOFs de uma maneira mais eficiente e rápida. Embora essa principal motivação ainda seja utilizada, com o tempo evoluiu para a possibilidade de triagem e estudo da influência de diferentes variáveis na preparação de novos materiais. No nosso grupo em Aveiro, o método de micro-ondas é utilizado em muitos casos como ferramenta de *screening* de diferentes condições experimentais, permitindo verificar a influência de temperatura, potência e tempos de reação nos materiais obtidos, num curto espaço de tempo. Usando este método é possível de uma forma mais simples e rápida obter as melhores condições experimentais para a preparação de determinado

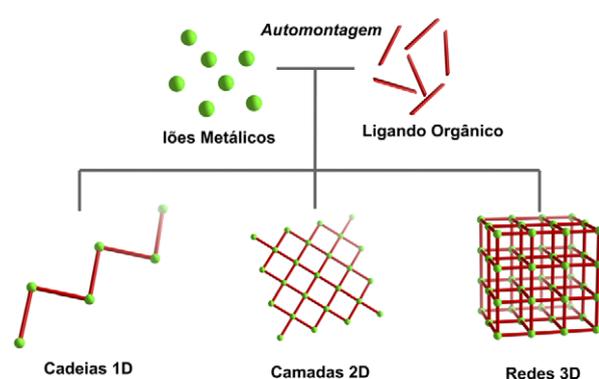


Figura 4 – Representação da formação de Redes Metal-Orgânicas com diferentes dimensionalidades.

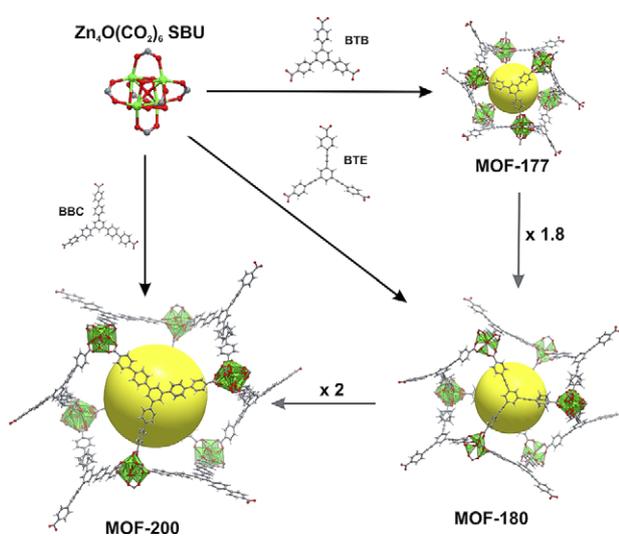


Figura 5 – Ilustração do controlo de tamanho de poro nos MOFs por alteração do tamanho do ligando orgânico usado.

Tabela 1 - Composição e condições de síntese por micro-ondas usadas na preparação de diferentes MOFs.

	Formula*	Condições			Ref.
		Potência (W)	Temperatura (°C)	Tempo de Reação (minutos)	
MOF-5	$[Zn_4O(bdc)_3]$	--	95-135	10-60	[20]
HKUST-1	$[Cu_3(btc)_2]$	300	150-220	1-240	[21]
MIL-101	$[Cr_3OH(H_2O)_2(bdc)_3]$	300	220	15	[22]
NH ₂ -MIL-101	$[Fe_3O(OH)(abdc)_3]$	--	150	15	[23]
MIL-100	$[Cr_3O(OH)(btc)_2]$	--	220	240	[17]
MIL-53(Al)	$[Al(OH)(bdc)]$	--	200	150	[24]
MIL-53(Cr)	$[Cr(OH)(bdc)]$	--	210	120	[24]
MIL-53(Fe)	$[Fe(OH)(bdc)]$	300	100	60	[25]
MIL-147(V)	$[V(OH)(bdc)]$	--	175	120	[24]
MIL-140A	$[ZrO(bdc)]$	--	220	1	[26]
MIL-88B	$[Fe_3O(bdc)_3]$	200	150	15	[27]
NH ₂ -MIL-88B	$[Fe_3O(abdc)_3]$	200	150	15	[27]
ZIF-8	$[Zn(MeIm)_2]$	80	243	180	[28]
MOF-74(Co)	$[Co_4O(dhbdca)_3]$	300	130	60	[29]
CPO-27	$[Co_2(DHTP)(H_2O)_2]$	400	70	44-180	[30]
UiO-66	$[Zr_6O_4(OH)_4(bdc)_6]$	--	120	15	[31]

*H₂bdc - Ácido benzeno-1,4-dicarboxílico; H₃btc - Ácido benzeno-1,3,5-tricarboxílico; H₂dhbdc - Ácido 1,2-di-hidroxibenzeno-1,4-dicarboxílico; H₂abdc - Ácido 2-amino-1,4-dicarboxílico; MeIm - 2-metilimidazolato; H₂DHTP - Ácido 1,5-di-hidroxitereftálico.

material, sendo também possível observar transições de um composto para o outro após, por exemplo, o aumento de temperatura (Figura 6) [18,19].

Para além da síntese de MOFs, esta técnica tem sido utilizada com bastante sucesso em duas novas vertentes: na pós-funcionalização de MOFs e na preparação de filmes finos/membranas. Embora ainda na sua infância, no que respeita a pós-funcionalização por micro-ondas, esta ocorre na componente orgânica do material, ou seja, no ligando orgânico. A introdução de novos grupos funcionais em MOFs, que de outro modo seria impossível obter por método de síntese normal, abre caminho a novas possibilidades e propriedades. Por exemplo, o grupo do Professor Yaghi utilizou esta abordagem na modificação do IRMOF-74-III (um MOF de magnésio) em que o grupo amino do ligando orgânico foi protegido com o grupo protetor Boc (Boc = *tert*-butiloxicarbonilo). A desproteção deste grupo necessita normalmente de condições mais drásticas (ácidos fortes, por exemplo), que pode levar ao colapso da estrutura do MOF [32,33]. No entanto, com o uso de micro-ondas, esta desproteção pode ser realizada em condições mais suaves, permitindo a pós-funcionalização contínua do IRMOF-74-III com diferentes aminoácidos (Figura 7) [34]. Esta incorporação de vários

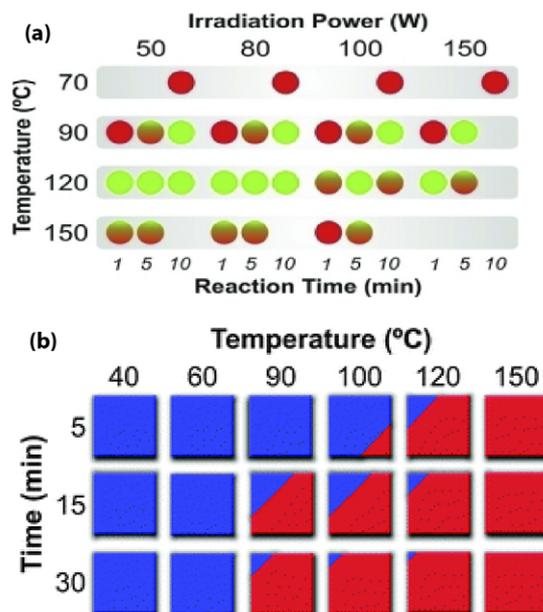


Figura 6 - Esquemas de otimização da temperatura, potência e do tempo de reação na preparação de dois sistemas de MOFs: (a) $[Ce_2(pydc)_3(H_2O)_2]$ (vermelho: material amorfo; verde: fase pura) e (b) $[La_2(H_3bmt)_2(H_2O)_2] \cdot 3H_2O$ (azul) e $[La_2(H_3bmt)_2(H_2O)_2] \cdot H_2O$ (vermelho) usando micro-ondas como método de síntese. Reproduzido com permissão das referências [18,19].

aminoácidos só foi possível usando esta abordagem de micro-ondas, que preserva a cristalinidade do material mesmo após quatro ciclos.

Relativamente à preparação de filmes finos/membranas, o ZIF-8 (de *Zeolitic Imidazole Framework*) tem sido o mais utilizado, principalmente devido ao seu potencial para adsorção e separação de gases. Kwon *et al.* desenvolveram com sucesso uma película fina de ZIF-8 sobre um suporte de alumina porosa ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) através de um método de *seeding* (Figura 8). O suporte foi imerso numa solução contendo o precursor metálico (nitrato de zinco) e transferido de seguida para uma solução com o ligando orgânico. A rápida formação de

cristais foi promovida pela radiação de micro-ondas (100 W, 1,5 minutos) [35]. Segundo os autores, os iões metálicos absorvem a radiação de micro-ondas, levando a um aumento de temperatura localizado que promove a rápida formação de nano-cristais de ZIF-8. O aumento da temperatura localizada, causado pela interação dos iões metálicos com a radiação de micro-ondas, leva a uma melhor fixação dos cristais de semente no suporte, resultando em filmes e membranas mais homogêneos e reproduzíveis do que os obtidos pelos métodos convencionais de *seeding*. O método foi também empregue com outros MOFs, tais como o ZIF-7 e SIM-1.

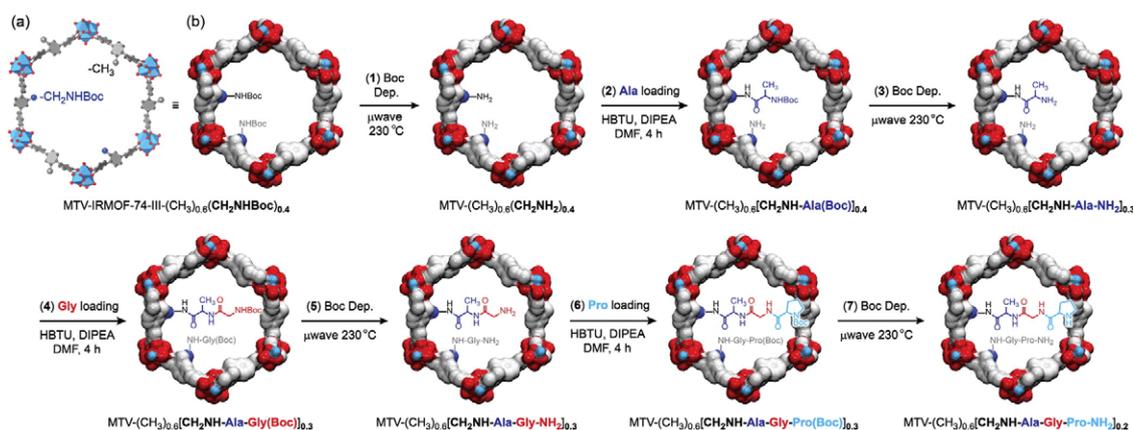


Figura 7 - (a) Representação poliédrica do poro do IRMOF-74-III funcionalizado com $-\text{CH}_2\text{NH}(\text{Boc})$. (b) As modificações pós-sintéticas (1) - (7) são ilustradas usando uma superfície de van der Waals: desproteções térmicas de Boc usando radiação de micro-ondas para (1), (3), (5) e (7); etapas de carregamento de aminoácidos para (2), (4) e (6) (Ala, Gly e Pro, respetivamente). Reproduzido com permissão da referência [34].

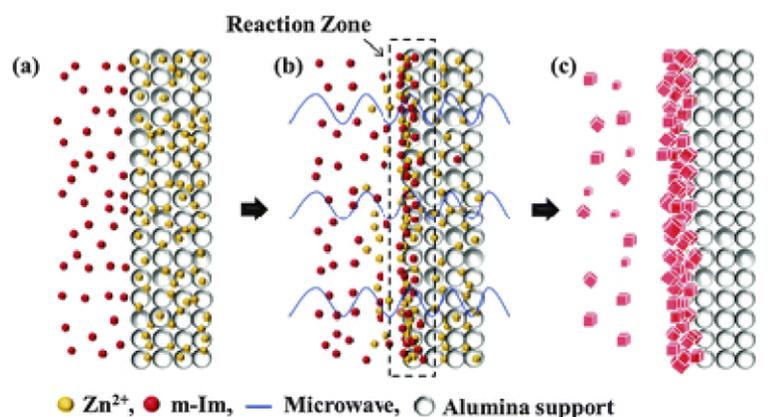


Figura 8 - Representação esquemática de um processo de *seeding* assistida por micro-ondas: (a) suporte saturado com uma solução de Zn^{2+} ; (b) formação de uma zona de reação na interface sob irradiação por micro-ondas; e (c) nucleação heterogênea perto da superfície do suporte. Reproduzido com permissão da referência [35].

4. Conclusões

Nos tempos modernos, em que novas tecnologias são o motor de novas descobertas, qualquer técnica de síntese de materiais que economize tempo e use solventes mais amigos do ambiente constitui um avanço para a investigação química. O aquecimento por micro-ondas surge como uma dessas novas tecnologias, proporcionando um método de síntese mais rápido, ecológico e de custo mais reduzido. Esta nova abordagem permite não só uma redução de tempo, como também evita a formação de reações secundárias, melhorando não só o rendimento das reações como a sua reprodutibilidade. É por estas razões que a síntese por micro-ondas tem vindo a ser cada vez mais uma

técnica preferencial, tanto no contexto académico como industrial. Permite não só a síntese de compostos orgânicos, mas também estruturas mais complexas do ponto de vista hierárquico tais como os MOFs.

Agradecimentos

Este trabalho foi desenvolvido no âmbito do projeto CICE-CO-Instituto de Materiais de Aveiro, UIDB/50011/2020 & UIDP/50011/2020, financiado por fundos nacionais através da FCT/MEC e quando aplicável cofinanciado pelo FEDER, no âmbito do Acordo de Parceria PT2020. RFM reconhece com gratidão a FCT pela posição de Investigador Júnior (CEECIND/00553/2017).

Referências

- [1] T.V. de Medeiros, J. Manioudakis, F. Noun, J.R. Macairan, F. Victoria, R. Naccache, *J. Mater. Chem. C*, **7** (2019) 7175-7195.
- [2] N.R. Khan, V.K. Rathod, *Process Biochem.*, **75** (2018) 89-98.
- [3] G. Yang, S.J. Park, *Materials*, **12** (2019).
- [4] ISI Web of Knowledge, www.webofknowledge.com, (acedido em 30-10-2019).
- [5] R. Gedye, F. Smith, K. Westaway, H. Ali, L. Baldisera, L. Laberge, J. Rousell, *Tetrahedron Lett.*, **27** (1986) 279-282.
- [6] D. Avinash, S. Akshata, S. Ravindra, *J. Drug Deliv. Ther.*, **9** (2019) 531-536.
- [7] P. Cao, N.E. Leadbeater, *Microwave Heating as a Tool for Sustainable Chemistry*, in: N.E. Leadbeater (Ed.), CRC Press, **2010**, pp. 73-103.
- [8] S. Chitra, N. Paul, S. Muthusubramanian, P. Manisankar, *Green Chem.*, **13** (2011) 2777-2785.
- [9] G. Burton, P. Cao, G. Li, R. Rivero, *Org. Lett.*, **5** (2003) 4373-4376.
- [10] H.C. Kolb, M.G. Finn, K.B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **40** (2001) 2004-2021.
- [11] R.B.N. Baig, R.S. Varma, *Chem. Commun.*, **48** (2012) 6220-6222.
- [12] E. Berrino, C.T. Supuran, *Expert. Opin. Drug Discov.*, **13** (2018) 861-873.
- [13] F. Mavandadi, A. Pilotti, *Drug Discov. Today*, **11** (2006) 165-174.
- [14] S. Kundu, L.H. Peng, H. Liang, *Inorg. Chem.*, **47** (2008) 6344-6352.
- [15] I. Bilecka, M. Niederberger, *Nanoscale*, **2** (2010) 1358-1374.
- [16] O.M. Yaghi, H. Li, *J. Am. Chem. Soc.*, **117** (1995) 10401-10402.
- [17] S.H. Jung, J.H. Lee, J.S. Chang, *Bull. Korean Chem. Soc.*, **26** (2005) 880-881.
- [18] S.M.F. Vilela, A.D.G. Firmino, R.F. Mendes, J.A. Fernandes, D. Ananias, A.A. Valente, H. Ott, L.D. Carlos, J. Rocha, J.P.C. Tomé, F.A.A. Paz, *Chem Commun.*, **49** (2013) 6400-6402.
- [19] P. Silva, D. Ananias, S.M. Bruno, A.A. Valente, L.D. Carlos, J. Rocha, F.A.A. Paz, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2013** (2013) 5576-5591.
- [20] J.S. Choi, W.J. Son, J. Kim, W.S. Ahn, *Microporous Mesoporous Mat.*, **116** (2008) 727-731.
- [21] N.A. Khan, S.H. Jung, *Bull. Korean Chem. Soc.*, **30** (2009) 2921-2926.
- [22] L. Bromberg, Y. Diao, H.M. Wu, S.A. Speakman, T.A. Hatton, *Chem. Mat.*, **24** (2012) 1664-1675.
- [23] K.M.L. Taylor-Pashow, J. Della Rocca, Z.G. Xie, S. Tran, W.B. Lin, *J. Am. Chem. Soc.*, **131** (2009) 14261-+.
- [24] N.A. Khan, J.W. Jun, J.H. Jeong, S.H. Jung, *Chem. Commun.*, **47** (2011) 1306-1308.
- [25] J. Jia, F.J. Xu, Z. Long, X.D. Hou, M.J. Sepaniak, *Chem. Commun.*, **49** (2013) 4670-4672.
- [26] W.B. Liang, R. Babarao, D.M. D'Alessandro, *Inorg. Chem.*, **52** (2013) 12878-12880.
- [27] M.Y. Ma, A. Betard, I. Weber, N.S. Al-Hokbany, R.A. Fischer, N. Metzler-Nolte, *Cryst. Growth Des.*, **13** (2013) 2286-2291.
- [28] Y.R. Lee, M.S. Jang, B.Y. Cho, H.J. Kwon, S. Kim, W.S. Ahn, *Chem. Eng. J.*, **271** (2015) 276-280.
- [29] H.Y. Cho, D.A. Yang, J. Kim, S.Y. Jeong, W.S. Ahn, *Catal. Today*, **185** (2012) 35-40.
- [30] E. Haque, S.H. Jung, *Chem. Eng. J.*, **173** (2011) 866-872.
- [31] M. Taddei, P.V. Dau, S.M. Cohen, M. Ranocchiarì, J.A. van Bokhoven, F. Costantino, S. Sabatini, R. Vivani, *Dalton Trans.*, **44** (2015) 14019-14026.
- [32] G.L. Stahl, R. Walter, C.W. Smith, *J. Org. Chem.*, **43** (1978) 2285-2286.
- [33] M. Prashad, D. Har, B. Hu, H.Y. Kim, M.J. Girgis, A. Chaudhary, O. Repic, T.J. Blacklock, *Org. Process Res. Dev.*, **8** (2004) 330-340.
- [34] A.M. Fracaroli, P. Siman, D.A. Nagib, M. Suzuki, H. Furukawa, F.D. Toste, O.M. Yaghi, *J. Am. Chem. Soc.*, **138** (2016) 8352-8355.
- [35] H.T. Kwon, H.K. Jeong, *Chem. Commun.*, **49** (2013) 3854-3856.

>

Filipe A. Almeida Paz

Licenciou-se pela Universidade de Aveiro (UA, 2000), e doutorou-se pela Universidade de Cambridge (Peterhouse College, Reino Unido) em Metal-Orgânico Frameworks (MOFs) e materiais zeolíticos. É atualmente Investigador Principal da UA, onde leciona nos três ciclos de estudos, e membro do CICECO – Instituto

de Materiais de Aveiro, Departamento de Química, UA. É detentor de vários prémios, destacando-se a Medalha Vicente de Seabra (2015) da SPQ. Fundou o Grupo de Cristalografia da SPQ e preside à Divisão de Química Inorgânica e Bioinorgânica. filipe.paz@ua.pt
ORCID.org/0000-0003-2051-5645.

>

*Ricardo F. Mendes

Obteve o seu doutoramento em Química em 2017 pela Universidade de Aveiro (UA) em Redes Metal-Orgânicas (MOFs). É membro do CICECO – Instituto de Materiais de Aveiro, Departamento de Química, UA – e ocupa o cargo de Investigador Júnior. Os seus interesses mais recentes têm-se focado na preparação

de novos eletrólitos de estado sólido baseados em Redes Metal-Orgânicas a serem incorporados na nova geração de baterias de Lítio e Sódio.
rfmendes@ua.pt
ORCID.org/0000-0001-8242-324X.

Cascas de Frutos Secos Como Bioissorventes: Uma Revisão Bibliográfica

>

Mariana Dias*
Bruno Henriques
Paula Figueira
João Pinto
Carlos Vale
Eduarda Pereira

A review on nutshells as biosorbents. *Nutshells are a natural, cheap and abundant source of biosorbent for the removal of potentially toxic elements from wastewaters. These materials contain diverse functional groups available for biosorption of positively charged ions. This work presents a review of some of the most recent and relevant studies on the application of nutshells as biosorbents, including details on the experimental parameters. Parameters with enhanced influence on biosorption are: matrix of the contaminated water, pH of the solution, initial concentration of potentially toxic elements, temperature at which the biosorption process occurs, amount of biosorbent, previous treatment of the biosorbents, and size of the particles used as biosorbents.*

As cascas de frutos secos são uma fonte natural, barata e abundante de bioissorventes para a remoção de elementos potencialmente tóxicos em águas residuais contaminadas. Estes materiais contêm diversos grupos funcionais disponíveis para a bioissorção de iões de carga positiva. Este trabalho apresenta uma revisão bibliográfica de alguns estudos relevantes mais recentes sobre a aplicação de cascas de frutos secos como bioissorventes, incluindo detalhes sobre os parâmetros experimentais. Os parâmetros com maior influência na bioissorção são: a matriz da água contaminada, o pH da solução, a concentração inicial dos elementos potencialmente tóxicos, a temperatura a que ocorre o processo de bioissorção, a quantidade de bioissorvente, o seu tratamento prévio, e o tamanho das partículas dos materiais usados na bioissorção.

Na vasta gama de biomassa com potencialidade para ser utilizada como bioissorvente, os resíduos agrícolas resultantes do processamento ou do consumo de frutos ou vegetais constituem uma fonte natural, barata e abundante [1]. São exemplos as cascas e caroços, que possuem uma estrutura porosa, facilitando assim a incorporação de contaminantes presentes em águas residuais. A sua utilização como bioissorventes proporciona a utilização destes, alcançando-se o efeito denominado por “tratamento de resíduos com resíduos” [2,3]. As cascas de frutos secos, especificamente, apresentam vantagens em relação às demais, uma vez que estas cascas, ao contrário das provenientes de outros frutos, não são perecíveis (Figura 1) [4].

Estas cascas pertencem à biomassa lenhinoce-lulósica que é composta maioritariamente por três



Figura 1 - Resíduos de cascas de frutos secos.

componentes: celulose, hemicelulose e lenhina. A lenhina é uma macromolécula tridimensional aromática e sem estrutura fixa, cuja quantidade diminui sistematicamente da camada externa para a camada interna da casca. Este composto confere rigidez à casca através de ligações químicas com hemicelulose e microfibrilas de celulose [5,6]. A lenhina apresenta uma elevada área superficial e proporciona resistência à deterioração microbiológica, à absorção de UV e confere impermeabilidade [7], sendo a sua estrutura composta por grupos carbonilo, hidroxilo e metilo. A celulose e hemicelulose contêm grupos funcionais com oxigénio, como grupos carbonilo, hidroxilo e grupos éter [3]. Estes três grupos formam complexos com os iões metálicos em solução através da partilha de eletrões.

Na Tabela 1 é apresentada a composição química típica das cascas de frutos secos.

Vários estudos procederam à análise de cascas de frutos secos através da técnica de espectroscopia de infravermelho (*Fourier transform infrared* - FTIR). Pehlivan *et al.* [9] registaram a presença de grupos hidroxilo associados a macromoléculas, como sejam a celulose e pectina, grupos C-H e grupos carboxilo livres e esterificados em cascas de amêndoa e avelã. Foram observados resultados semelhantes em cascas de avelã por Maaloul *et al.* [2]. Segovia-Sandoval *et al.* [10] mostraram a presença, em cascas de noz, de grupos hidroxilo, grupos C-H (presentes na celulose, hemicelulose e lenhina), grupos C=O, assim como grupos C-O, característicos de álcoois, ésteres e grupos carboxílicos. Moussavi & Barikbin [11] obtiveram resultados semelhantes em cascas de pistáchio. Estes estudos evidenciam a existência de diversos grupos funcionais disponíveis para biossorção de iões de carga positiva nas superfícies das cascas destes frutos secos.

Foi realizada uma pesquisa bibliográfica na principal base de dados da *Web of Science* utilizando as seguintes palavras-chave: *nutshells*, *biosorption* e *heavy metals*. Foram considerados artigos publicados a partir de 2000, ano do trabalho mais antigo encontrado na literatura na temática da presente revisão, que se tornou objeto de estudo mais frequente no período de 2008 a 2019. A Tabela 2 reporta as publicações mais relevantes selecionadas, assim como os principais dados experimentais reportados.

Tabela 1 - Composição típica das cascas de amendoim e avelã referida em Saur-Calixto *et al.* [8] e das cascas de amêndoa, noz e pistáchio mencionada em Li *et al.* [6].

Biomassa	Hemicelulose (%)	Celulose (%)	Lenhina (%)
Casca de amendoim	16	39	28
Casca de amêndoa	29	38	30
Casca de avelã	25	37	30
Casca de noz	28	36	44
Casca de pistáchio	25	43	16

Tabela 2 - Detalhes experimentais de estudos de biossorção de metais potencialmente tóxicos em cascas de frutos secos.

Referência	Biossorvente	Elemento	Dopagem	Tipo de água	pH	Concentração inicial (g/L)	(kg m ⁻³)	Tempo de contacto (min)	T (°C)	Capacidade de sorção (mol kg ⁻¹) /remoção (%)	Tamanho da partícula (m)	Tratamento prévio
Vaghetti <i>et al.</i> [12]	Casca de nozes pecã	Cu Mn Pb	Individual	Destilada	5-6	[Cu]: 0,15-16 [Mn]: 0,18-18 [Pb]: 0,048-4,8	1-15	5-360	-	Cu: 1,35 Mn: 1,78 Pb: 0,946	0,45x10 ⁻³	Lavagem com água a temperatura ambiente + lavagem com água quente (2 h) + segunda lavagem com água a temperatura ambiente + secagem (70 °C, 2 h) + trituração e peneiração.
Pehlivan & Altun [13]	Casca de noz, avelã e amêndoa	Cr	Individual	Milli-Q	2-3,5	1x10 ⁻³	25	100	25	Noz: 85,3 Avelã: 88,5 Amêndoa: 55,0	<100x10 ⁻⁶	Lavagem com água desionizada + secagem (100 °C, 24 h)
Altun & Pehlivan [14]	Casca de noz	Cr	Individual	Destilada	2-9	0,1x10 ⁻³ -1,0x10 ⁻³	5	5-240	25, 35, 50, 65	Sem tratamento: 0,154 Com tratamento com ácido cítrico (CA): 0,596	<100x10 ⁻⁶	Lavagem com água desionizada + secagem (100 °C, 24 h) Tratamento com CA (0,1-0,2 g/mL; 60 °C, 24 h) + mistura com água pura (120 °C, 4 h) + filtração e lavagem + secagem: (45 °C, 16 h)

Tabela 2 - Detalhes experimentais de estudos de bio sorção de metais potencialmente tóxicos em cascas de frutos secos (cont.).

Referência	Biossorvente	Elemento	Dopagem	Tipo de água	pH	Concentração inicial (g/L)	(kg m ⁻³)	Tempo de contacto (min)	T (°C)	Capacidade de sorção (mol kg ⁻¹) /remoção (%)	Tamanho da partícula (m)	Tratamento prévio
Wang et al. [15]	Casca de noz	Cr	Individual	Desionizada	1-7	1,92	5	420	30	97,3	<0,15x10 ⁻³ (100 mesh)	Lavagem com água destilada + secagem a temperatura ambiente + trituração
Witek-krowiak et al. [16]	Casca de amendoim	Cu Cr	Individual	Destilada	2-5	[Cu]: 0,16-16 [Cr]: 0,19-19	0,01-20	90	20-60	Cu: 0,400 Cr: 0,536	<30 x10 ⁻⁶	Lavagem: água da torneira (1-2 h) + água destilada + secagem (50 °C, 24 h)
Feizi & Jalali [17]	Casca de noz	Fe Mn Zn Ni Cu Cd	Individual e mistura	Destilada	4-8	[Fe]: 1,8 [Mn]: 1,8 [Zn]: 1,5 [Ni]: 1,7 [Cu]: 1,6 [Cd]: 0,89	2	20-600	Ambiente	Individual: Cd: 0,68x10 ⁻³ ; Cu: 0,61x10 ⁻³ Ni: 0,50x10 ⁻³ Zn: 0,51x10 ⁻³ Mn: 0,52 x10 ⁻³ Fe: 1,12x10 ⁻³ Mistura: Cd: 0,074 x10 ⁻³ Cu: 0,11 x10 ⁻³ Ni: 0,077 x10 ⁻³ Zn: 0,13 x10 ⁻³ Fe: 0,15 x10 ⁻³ Mn: 0,17x10 ⁻³	<1x10 ⁻³	Lavagem com água destilada + secagem (80 °C, 24 h)
Abdelfattah et al. [18]	Casca de amendoim	Pb Mn Cd Ni Co Fe Cr Cu Zn	Mistura	Água recolhida de indústria de metal	3-8	[Pb]: 1,3x10 ⁻³ [Fe]: 0,038 [Cr]: 0,86 [Cu]: 0,18 [Zn]: 0,18 [Cd]: 0,41 [Mn]: 0,95 [Co]: 0,71 [Ni]: 0,52	5	60	25	Pb: 100 Fe: 95 Cr: 56 Cu: 45 Zn: 41 Cd: 38 Mn: 38 Co: 30 Ni: 24	-	Lavagem com água da torneira e água desionizada + secagem: (80 °C, 12 h). Segunda lavagem com água desionizada, HCl diluído, NaOH diluído e água desionizada + secagem (80 °C, 24 h)
Rozumová et al. [4]	Casca de amendoim	Cd Pb	Individual e mistura	Desionizada	-	[Cd]: 8,9x10 ⁻³ - 6,2 [Pb]: 4,8x10 ⁻³ - 3,4	4	60	Ambiente	I: Pb: 0,14; Cd: 0,068 M: Pb: 0,10; Cd: 0,057	<0,50 x10 ⁻³	Trituração + suspensão das cascas em metanol e óxido de ferro (25,2 mg/mL) + agitação durante 1 h + lavagem com metanol + secagem (temperatura ambiente)
Pehlivan et al. [9]	Casca de avelã e amêndoa	Pb	Individual	Destilada	2-9	1x10 ⁻³	6,3	240	-	Avelã: 0,136 Amêndoa: 0,0389	<75x10 ⁻³	Lavagem com água desionizada + secagem (100 °C, 24 h)
Segovia-Sandoval et al. [10]	Casca de noz	Zn	Individual	Desionizada	3; 5; 6; 7	0,91-9,2	1,2; 3	1700	25	Sem tratamento: 0,263 Com tratamento com ácido cítrico (CA) (2 M): 0,426	0,45x10 ⁻³	Lavagem com água destilada + secagem (75 °C, 24 h) + trituração e peneiração. Adição de CA (2 mol/L; 2 h, 60 °C) + arrefecimento (3 h) + secagem (80 °C, 24 h) + aumento da T (110 °C, 3 h) + lavagem + secagem (80 °C, 24 h).
Maaloul et al. [2]	Casca de amêndoa	Cu	Individual	Desionizada	1-6	3,1	4	5-180	30-60	Branqueamento (BAS): 0,294 BAS liofilizadas (L-BAS): 0,445	<0,25x10 ⁻³	BAS: adição etanol e clorofórmio (temperatura ambiente) + adição de NaOH (80-90 °C) + adição de NaClO (70 °C) L-BAS: BAS liofilizada a 70 °C a 0,1 mbar.
Moussavi & Barikbin [11]	Casca de pistáchio	Cr	Individual	Águas residuais de galvanização de Cr	2	0,48	1; 1,5; 2	3-60	25	100% para 2 g/L	0,074x10 ⁻³ (200 mesh)	Secagem ao ar por 3 dias.

Tabela 2 - Detalhes experimentais de estudos de bio sorção de metais potencialmente tóxicos em cascas de frutos secos (cont.).

Referência	Biossorbente	Elemento	Dopagem	Tipo de água	pH	Concentração inicial (g/L)	(kg m ⁻³)	Tempo de contacto (min)	T (°C)	Capacidade de sorção (mol kg ⁻¹) /remoção (%)	Tamanho da partícula (m)	Tratamento prévio
Cimino <i>et al.</i> [19]	Casca de avelã	Cd Cr Zn	Individual (I) e mistura (M)	Destilada	1-7	I Sem tratamento (ST): [Cd] _i :0,129 x10 ⁻³ [Cd] _f :0,830 x10 ⁻³ [Cd] _s :2,562 x10 ⁻³ [Cr] _i :0,135 x10 ⁻³ [Cr] _f :0,894 x10 ⁻³ [Cr] _s :2,562 x10 ⁻³ [Zn] _i :0,130 x10 ⁻³ [Zn] _f :0,830 x10 ⁻³ [Zn] _s :2,562 x10 ⁻³	4	300	20	I ST: Cd _s : 92,4 Cd _f : 27,5 Cd _i : 14,7 Cr _s : 94,6 Cr _f : 28,3 Cr _i : 16,1 Zn _s : 87,9 Zn _f : 21,0 Zn _i : 12,7	0,3-0,8 x10 ⁻³	Secagem (24 h, 60 °C) + trituração e peneiração
						M ST: [Cd] _i :0,053 x10 ⁻³ [Cd] _f :0,129 x10 ⁻³ [Cd] _s :0,830 x10 ⁻³ [Cr] _i :0,054 x10 ⁻³ [Cr] _f :0,135 x10 ⁻³ [Cr] _s :0,894 x10 ⁻³ [Zn] _i :0,054 x10 ⁻³ [Zn] _f :0,130 x10 ⁻³ [Zn] _s :0,838 x10 ⁻³				M ST: Cd: 95,0 Cd _f : 76,8 Cd _s : 2,86 Cr: 95,9 Cr _s : 98,5 Cr _f : 28,3 Zn: 93,4 Zn _f : 69,1 Zn _s : 1,39		
						M com tratamento (CT): [Cd] _i :0,830 x10 ⁻³ [Cr] _i :0,894 x10 ⁻³ [Zn] _i :0,840 x10 ⁻³				M CT: Cd: 45,2 Cr: 94,2 Zn: 43,1		

Na generalidade, os estudos foram efetuados com soluções contaminadas em água destilada ou desionizada, com a exceção de dois estudos que usaram águas residuais [11,18]. Em Abdelfattah *et al.* [18] foram utilizados 5 g de cascas de amendoim por litro de água residual industrial a pH 6 durante 1 hora. Não é referida a granulometria das cascas, no entanto, a solução foi filtrada após a experiência. Foram obtidas remoções de 100% (Pb), 95% (Fe), 56% (Cr), 45% (Cu), 41% (Zn), 38% (Cd), 38% (Mn), 30% (Co) e 24% (Ni). É necessário notar que a concentração molar de Pb na solução era a mais baixa (1,25x10⁻³ mM) quando comparada com a dos restantes elementos. O Mn foi o elemento com maior concentração molar em solução (0,95 mol dm⁻³) e apresentou uma baixa percentagem de remoção (38%). Moussavi & Barikbin [11] aplicaram cascas de pistáchio com o tamanho de 0,074 mm, sem qualquer tratamento ou modificação química, para remover 25 mg/L de

romo da água residual proveniente da galvanização de cromo a pH 2,1. A remoção decorreu durante 1 hora, com razões de massa de sorvente/volume de solução de 1, 1,5 e 2 kg m⁻³. A eficiência de bio sorção foi respetivamente de 88, 99 e 100%.

A literatura refere granulometrias extremamente baixas para os bio sorventes, geralmente inferiores a 1 mm, e em dois casos granulometrias inferiores a 100 µm [13,14]. Pehlivan & Altun [13], utilizando 25 g/L de cascas de noz, avelã e amêndoa, obtiveram remoções respetivamente de 85, 88 e 55%. A razão entre a massa de sorvente e o volume de solução na maioria dos estudos oscilou entre 0,01 e 25 kg m⁻³, sendo 3 kg m⁻³ a proporção mais frequentemente reportada. É de notar que, de um modo geral, quanto mais elevada for a massa de bio sorvente, maior é o número de sítios ativos disponíveis para o mecanismo de bio sorção e, portanto, esta torna-se mais eficiente.

Contudo, os fatores a ter em conta na escolha da massa a utilizar não deve ser apenas a sua eficiência, mas também a obtenção da menor quantidade de resíduos. Witek-krowiak *et al.* [16] testaram massas entre 0,1 a 18 kg m⁻³ de casca de amendoim e verificaram uma relação linear entre a percentagem de remoção e a massa de biossorbente, até à concentração máxima de 10 kg m⁻³. Acima deste valor o aumento na eficiência tornou-se mais moderado.

Os valores de pH dos estudos publicados variaram entre 1 e 9, sendo o intervalo de 2 a 7 o mais estudado. Diversos estudos testaram o efeito do pH na eficiência de remoção, como é o caso de Altun & Pehlivan [14] que apontaram um pH inferior a 3 como pH ótimo para remoção de Cr com cascas de noz, enquanto Segovia-Sandoval *et al.* [10] com o mesmo biossorbente, apontaram um pH ótimo de 6 para remoção de Zn. Esta diferença evidencia a necessidade de otimizar o pH da solução para a remoção de cada elemento. Abdelfattah *et al.* [18] e Witek-Krowiak *et al.* [16] compararam a remoção de Cu e Cr através de cascas de amendoim, apresentando um pH ótimo de aproximadamente 6 e 5, respetivamente. É sabido que o pH afeta a protonação dos grupos funcionais da biomassa e, assim, pode influenciar a captação dos elementos por ela. Por exemplo, quando o pH é demasiado baixo, a concentração de prótons em solução aumenta e, conseqüentemente, a competição com cátions pelos sítios ativos na superfície dos biossorbentes será favorecida. Por outro lado, para valores de pH demasiado elevados, os cátions metálicos tendem a precipitar, dada a elevada concentração de aniões hidróxido em solução. De acordo com os estudos citados, a remoção dos elementos tende a ser maior a pH inferiores a 7. No entanto, é de notar que o efeito do pH na eficiência de remoção está dependente do contaminante a ser removido e dos grupos funcionais dos materiais sorventes, em particular do seu ponto de carga zero (PCZ). O valor de pH para o qual a superfície do sorvente tem carga zero, isto é, a superfície tem igual número de cargas positivas e cargas negativas é chamado de PCZ. Para valores de pH superiores ao PCZ, a carga da superfície do sorvente será negativa, favorecendo interações eletrostáticas com cátions em solução.

Relativamente ao pré-tratamento dos biossorbentes, a bibliografia indica que na maioria dos casos se usam modificações físicas, principalmente trituração, lavagem e secagem em estufa. Apenas em um estudo, os biossorbentes foram liofilizados [2], verificando-se uma capacidade de sorção de 0,445 mol kg⁻¹ para as cascas liofilizadas e 0,294 mol kg⁻¹ para cascas não liofilizadas. Em relação a modificações químicas, este estudo de Maaloul *et al.* [2] refere que os biossorbentes sofreram um tratamento com etanol e clorofórmio, seguido de alcalinização com NaOH e tratamento com NaClO. Altun & Pehlivan [14] e Segovia-Sandoval *et*

al. [10] indicam que as cascas de noz foram tratadas com ácido cítrico. Em ambos os estudos, foram obtidos melhores resultados para os biossorbentes que sofreram tratamento, uma vez que este teve como objetivo a adição de grupos carboxilo. Segovia-Sandoval *et al.* [10] mostraram que a capacidade de sorção duplica com pré-tratamento (0,426 mol kg⁻¹) em relação às cascas sem tratamento (0,263 mol kg⁻¹). Em Altun & Pehlivan [14] esta diferença foi mais ampliada, entre 0,596 mol kg⁻¹ e 0,154 mol kg⁻¹. Abdelfattah *et al.* [18] indicam que os biossorbentes, para além de lavados com água destilada, foram tratados com HCl diluído, assim como com NaOH diluído. Rozumová *et al.* [4] submetem os biossorbentes a uma modificação magnética com metanol e óxido de ferro, de modo a facilitar a sua separação da fração líquida.

Nos trabalhos publicados, a concentração inicial da solução variou entre os 0,1 mg/L e os 19 g/L, mas a maior parte das soluções apresentaram concentrações entre 4 e 5 g/L. É importante referir que estas soluções foram contaminadas com um elemento, e apenas em três estudos foram utilizadas misturas de elementos em solução. Na generalidade dos estudos, as experiências decorreram à temperatura ambiente. Três estudos testaram o processo de biossorção a temperaturas acima de 25 °C, como por exemplo Altun & Pehlivan [14] com temperaturas de 35, 50 e 60 °C, Witek-Krowiak *et al.* [16] de 20-60 °C e Maaloul *et al.* [2] de 30-60 °C. Nestes estudos é descrito um ligeiro aumento na capacidade de biossorção com o aumento da temperatura, embora a capacidade de biossorção tenha diminuído para temperaturas demasiado elevadas, sugerindo a danificação dos sítios ativos de ligação na biomassa.

Em resumo, esta pesquisa bibliográfica mostrou o estudo dos parâmetros mais relevantes para a eficiência destes materiais como biossorbentes. Contudo, a maioria dos estudos usa condições simplistas, como seja a matriz das águas contaminadas. Os testes realizados em água destilada ou desionizada não leva em consideração o possível efeito da matéria orgânica dissolvida na complexação dos metais em solução e, conseqüentemente, a competição com os processos de sorção. Na generalidade, os ensaios são realizados em sistemas individuais, não tendo em conta a possível competição entre elementos presentes em sistemas multielementares. Apesar da disponibilidade das cascas de frutos secos, a quantidade de biossorbente a utilizar deve ser a menor possível para minorar o problema dos resíduos finais. O estudo da dose de biossorbente, razão massa/volume é também um ponto que deverá ser otimizado. Dada a acessibilidade destes materiais seria interessante propor, no futuro, os melhores procedimentos experimentais (tempo, tipo de biossorbente, dose de biossorbente) para diversas tipologias de águas residuais, tendo em consideração os elementos a remover, o pH das águas e a carga de matéria orgânica.

Agradecimentos

Bruno Henriques beneficiou de um contrato de investigador financiado por fundos nacionais através da FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, I.P., no âmbito da celebração do contrato-programa previsto nos números 4, 5 e 6 do art. 23.º do D.L. n.º 57/2016, de 29 de agosto, alterado pela Lei n.º 57/2017, de 19

de julho. Paula Figueira beneficiou de uma bolsa de doutoramento (SFRH/BD/139077/2018) financiada por fundos nacionais através da FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, I.P. São devidos agradecimentos à FCT/MCTES pelo apoio financeiro ao CESAM (UID/AMB/50017/2019) através de fundos nacionais.

Referências

- [1] F.A. Pavan *et al.*, *J. Hazard. Mater.* **137** (2006) 527-533.
- [2] N. Maaloul *et al.*, *J. Environ. Chem. Eng.* **5** (2017) 2944-2954.
- [3] Y. Dai *et al.*, *Chemosphere* **211** (2018) 235-253.
- [4] L. Rozumová *et al.*, *J. Environ. Chem. Eng.* **4** (2016) 549-555.
- [5] A. Demirbas, *J. Hazard. Mater.* **157** (2008) 220-229.
- [6] X. Li *et al.*, *Materials (Basel)* **11** (2018) 1782.
- [7] P. Azadi *et al.*, *Renew. Sustain. Energy Rev.* **21** (2013) 506-523.
- [8] F. Saura-Calixto *et al.*, *Z. Lebensm. Unters. Forsch.* **177** (1983) 200-202.
- [9] E. Pehlivan *et al.*, *J. Hazard. Mater.* **167** (2009) 1203-1208.
- [10] S.J. Segovia-Sandoval *et al.*, *J. Water Process Eng.* **25** (2018) 45-53.
- [11] G. Moussavi & B. Barikbin, *Chem. Eng. J.* **162** (2010) 893-900.
- [12] J.C.P. Vagheti *et al.*, *J. Hazard. Mater.* **162** (2009) 270-280.
- [13] E. Pehlivan & T. Altun, *J. Hazard. Mater.* **155** (2008) 378-384.
- [14] T. Altun & E. Pehlivan, *Food Chem.* **132** (2012) 693-700.
- [15] X.S. Wang *et al.*, *J. Environ. Manage.* **90** (2009) 721-729.
- [16] A. Witek-krowiak *et al.*, *Desalination.* **265** (2011) 126-134.
- [17] M. Feizi & M. Jalali, *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* **54** (2015) 125-136.
- [18] I. Abdelfattah *et al.*, *Environ. Nanotechnology, Monit. Manag.* **6** (2016) 176-183.
- [19] G. Cimino *et al.*, *Water Res.* **34** (2000) 2955-2962.

>

Bruno Henriques

PhD, é investigador no departamento de Química da Universidade de Aveiro. A sua área de atividade científica engloba Química Analítica Ambiental e Biotecnologia Ambiental, sendo a sua investigação focada na remediação de águas contaminadas, particularmente na remoção de contaminantes através de tecnologias inovadoras, como biosorventes e nanomateriais.
brunogalinho@ua.pt
ORCID.org/0000-0002-6472-5479.

>

Carlos Vale

Possui habilitação/agregação em oceanografia química, ex-diretor de departamento, diretor do conselho científico e vice-diretor do IPMA e vice-presidente do CIEM. A sua especialização inclui o comportamento de contaminantes nos

ecossistemas marinhos, as interações com os organismos e os impactos dos contaminantes nos sistemas ambientais em evolução.
carlos.vale@ciimar.up.pt
ORCID.org/0000-0003-0162-1960.

>

Eduarda Pereira

É professora associada no Departamento de Química da Universidade de Aveiro e coordenadora do Laboratório Central de Análises da Universidade de Aveiro. Possui experiência científica na avaliação da qualidade ambiental e poluição de zonas estuarinas e costeiras, incluindo bioacumulação e bio-amplificação de elementos potencialmente tóxicos ao longo de cadeias tróficas estuarinas. eduper@ua.pt
ORCID.org/0000-0002-6046-5243.

>

João Pinto

É mestre em Ciências do Mar e da Atmosfera pelo Departamento de Física da Universidade de Aveiro e bolseiro de investigação no Laboratório Central de Análises da Universidade de Aveiro. A sua investigação baseia-se na avaliação de toxicidade de contaminantes emergentes e na sua recuperação através de processos de bioacumulação por parte de macroalgas marinhas.
joao.pedro.pinto@ua.pt
ORCID.org/0000-0002-6175-2906.

>

*Mariana Dias

É mestre em Biotecnologia Molecular e licenciada em Bioquímica pelo Departamento de Química da Universidade de Aveiro. A sua investigação foca-se no tratamento de águas contaminadas através da remoção de contaminantes

clássicos e emergentes utilizando sorventes biológicos, com especial destaque a resíduos provenientes da indústria alimentar.
marianadias@ua.pt
ORCID.org/0000-0002-9739-8865.

>

Paula Figueira

É mestre em Química Analítica e Controlo de Qualidade e doutoranda no Departamento de Química da Universidade de Aveiro. Na sua investigação destaca-se a remoção de elementos potencialmente tóxicos de águas naturais com base em processos magnéticos e de biossorção e a utilização de bio-resíduos para remediação de águas com fim à sua reutilização.
paulafigueira@ua.pt
ORCID.org/0000-0001-5728-9675.

Stephanie Louise Kwolek – Kevlar, a Fibra à Prova de Bala

> Raquel Gonçalves Maia

Stephanie Louise Kwolek – Kevlar, the bulletproof fiber. *Stephanie Kwolek was an American chemist who, working in DuPont research labs, discovered a synthetic polymer, an aramid, stronger and lighter than steel and bulletproof – Kevlar. “Saved by Kevlar”, it’s been a miracle for thousands of lives. She was born to Polish immigrants in New Kensington (Pennsylvania) and graduated from Carnegie Institute of Technology. At DuPont, she has also contributed largely to the development of low temperature polymerization processes. Her paper “The Nylon Rope Trick” is still a key piece for a common science classroom experiment. Kwolek’s story – her childhood, achievements and works – is the story of a woman’s life devoted entirely to chemistry.*

Stephanie Kwolek foi uma química norte-americana que, a trabalhar nos laboratórios de investigação da DuPont, descobriu um polímero sintético, uma aramida, mais forte e mais leve do que o aço e à prova de bala – o Kevlar. “Salvo pelo Kevlar”, tem sido um milagre para milhares de vidas. Filha de pais emigrantes polacos, Kwolek nasceu em New Kensington (Pensilvânia) e graduou-se pelo Carnegie Institute of Technology. Na DuPont, muito contribuiu também para o desenvolvimento de processos de polimerização a baixa temperatura. O seu artigo “The Nylon Rope Trick” é ainda hoje peça fundamental na experiência em sala de aula. A história de Kwolek – a sua infância, as suas conquistas, os seus trabalhos – é a história da vida de uma mulher inteiramente dedicada à química.

Quando, em 1964, Stephanie Kwolek iniciou investigação sobre a procura de novas fibras resistentes e rígidas estava longe de saber que se tornaria numa supermulher. De facto, Kwolek, com o seu escasso metro e meio, inventou uma fibra mais forte do que o aço, “à prova de bala” – o Kevlar [1-3].

1. Da Polónia para os EUA

Nascida no seio de uma família humilde, em 31 de julho de 1923, Stephanie (Stefania) Louise Kwolek, veio a ter um irmão Stephen (Stanislaw), dois anos mais novo, Stefi e Stas, em família. Os pais, Aniela (Nellie) Zajdel e Jan (John) Kwolek, tinham nascido na região de Krosno, uma bonita província implantada no sudeste florestal da Polónia. Tal como muitos habitantes locais, também eles emigraram para os EUA, ainda muito jovens, em fuga à pobreza. O encontro e o casamento tiveram lugar na “terra das oportunidades” e os dois filhos vieram ao mundo em New Kensington (Pensilvânia).

John Kwolek, amador convicto da Natureza, era moldador numa pequena fundição local. Morreu cedo, com pouco mais de quarenta anos, em consequência de uma pneumonia num pós-operatório a uma hér-



Figura 1 – Stephanie Louise Kwolek (1970).
© Hagley Museum & Library.

Figura 2 - Stephanie Kwolek (1926).
© Hagley Museum & Library.



nia. Stephanie tinha 10 anos. Nellie, nove anos mais nova que o marido, costurava em casa, mas veio a empregar-se na *Aluminium Company of America*, no departamento de produção de utensílios culinários, a fim de poder sustentar a família. Apesar das dificuldades financeiras, ambos os filhos estudaram no *Carnegie Institute of Technology*, uma escola de engenharia que veio a integrar a Universidade Carnegie Mellon (Pittsburgh, Pensilvânia) [4].

Stephanie era muito boa aluna, gostava de ciências da natureza e de matemática, explorava a fauna e a flora dos bosques e dos riachos circundantes, sempre acompanhada do irmão, e alimentava o desejo de ser estilista nos múltiplos vestidos que desenhava para as suas bonecas; ou então professora, função que sempre desempenhava com as crianças suas vizinhas. Gostava de ler e de escrever. Para memória ficou a sua fotografia aos 3 anos montada num pônei e um desenho a decorar uma carta de Natal enviada em 1928 ao seu avô paterno na Polónia [3].

2. Do Margaret Morrison Carnegie College para a DuPont

O *Margaret Morrison Carnegie College*, fundado em 1903, era o *College* para raparigas do *Carnegie Institute of Technology*. A educação primava pelo rigor e, em tempo da Segunda Guerra Mundial, o seu cunho era marcadamente feminista - não ter medo de falar no que se acreditava ser certo e exigir excelência em tudo o que se fazia.

Bolsas de estudo, pelo seu elevado nível académico, e trabalho de férias custeavam agora os estudos de Stephanie. Durante o verão, trabalhou nos laboratórios da Escola de Bioquímica da Universidade de Pittsburgh, dedicados à investigação de porfirinas, e no laboratório de investigação da empresa *Gulf Oil* em Harmarville, em estudos de fracionamento de derivados do petróleo que envolviam avançados cálculos matemáticos.

Em 1946, Stephanie Kwolek sai do *Carnegie Institute of Technology* empunhando o seu canudo de "*bachelor of science*", BSc., especializada em química (*major*) e em biologia (*minor*). No seu horizonte está agora o curso de medicina; mas, para já não pode pagá-lo, teria de economizar primeiro...

Ao tempo, a *DuPont* (*E. I. DuPont de Nemours and Company*) tinha em William Hale Charch (1898-1958), cientista que revolucionara a produção do celofane em 1927, um dinâmico entrevistador de potenciais químicos para integrarem a empresa. Kwolek não hesitou.

Acrescente-se que no pós-guerra muitos empregos, antes prioritariamente para homens, estavam agora abertos a mulheres. A *DuPont* foi pioneira neste domínio. Escasseava a mão de obra masculina qualificada e as raparigas tinham tomado de assalto a universidade.

A entrevista correu bem. Hale Charch ficou agrado e assegurou a Kwolek que o resultado lhe seria comunicado "dentro de poucas semanas". "Será que não me poderia dizer antes, outras empresas esperam a minha resposta...", arriscou Sephanie. Era verdade, mas também era verdade que o trabalho na *DuPont* era o que mais a seduzia e a empresa, ao contrário de muitas outras, pagava salários iguais para iniciados de ambos os sexos [5]. No instante seguinte foi-lhe oferecido emprego - no laboratório de investigação do *Textile Fibers Department* da *DuPont* [6], em Buffalo, Nova Iorque, laboratório onde eram ensaiadas as primeiras pesquisas!

Não era comum que a empresa contratasse químicos apenas com o grau BSc. Alguns fatores foram decisivos: a forma resoluta como Kwolek se apresentou, a par com as suas notas excelentes [7] e a prática laboratorial prévia.

Tinham decorrido apenas oito anos desde que Wallace Carothers (1896-1937) criara para a *DuPont* o Nylon, a primeira fibra totalmente sintética [8]. A investigação e produção de novas fibras fervilhava de entusiasmo. Kwolek dirá que os seus primeiros anos de laboratório na *DuPont* foram "um desafio, uma constante aprendizagem". Trabalhou primeiro sob a orientação de Emerson L. Wittbecker em poliamidas, síntese de intermediários e de polímeros, depois, com Emmette K. Izard, o presumível inventor do poliéster Dacron, na preparação de intermediários suscetíveis de conduzirem à obtenção de novos poliésteres, e com

Paul Winthrop Morgan (1911-1992) em derivados da celulose, películas e corantes [9, 10].

No bem equipado laboratório, Kwolek aprendeu a fazer longas moléculas que podiam ser transformadas em têxtil ou em plástico – matérias novas, que ainda não faziam parte dos currículos universitários.

“Estava tão interessada na química e na investigação que esqueci totalmente a medicina”, afirmou Stephanie Kwolek anos mais tarde. E, para mais, Buffalo era socialmente atraente. Mas estava-lhe destinada uma grande mudança.

A instalação de investigação e desenvolvimento da divisão de fibras têxteis da DuPont, o *Pioneering Research Laboratory*, que fora fundado em 1935 em Buffalo, muda-se para Wilmington, Delaware, como extensão da famosa *Experimental Station* em 1951 [11].

Stephanie Kwolek retarda ao máximo a sua transferência para Wilmington. Parte em 1954. “Foi um momento triste e de grande incerteza para mim”, dirá Kwolek [1]. Ninguém adivinha o futuro, mas para ela foi o momento em que principiou a sua verdadeira exploração.

3. Polimerização a baixa temperatura

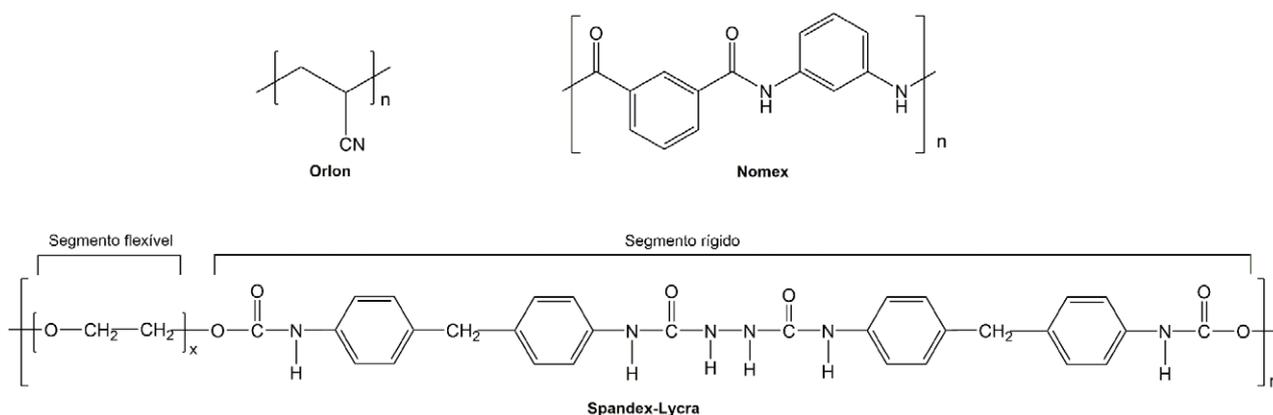
Em 1986 Stephanie Kwolek foi protagonista de uma longa e didática conversa com o seu colega Raymond C. Ferguson, cientista versátil, desde a espectroscopia molecular até à caracterização de polímeros. Quando confrontada com a questão de quais considerava serem as suas contribuições mais significativas para a ciência química, respondeu que, “em segundo lugar”, tinha sido “a descoberta e o desenvolvimento, em colaboração, de processos de polimerização a baixa temperatura para preparação de poliamidas aromáticas e outros polímeros de condensação” e de adição, homo- e copolímeros [1].



Figura 3 - Grupo dos Polímeros, Laboratório DuPont, Buffalo, Nova Iorque, 1948. Da esquerda para a direita: Stephanie Kwolek, sentada, é a segunda; E. Wittbecker é o último na segunda fila e E. Izard e P. Morgan são segundo e terceiro, respetivamente, na última fila. © Hagley Museum & Library

Previamente, estes polímeros eram “intratáveis”, não fundiam ou degradavam-se antes de fundirem. Emerson Wittbecker iniciara investigação em 1950, tendo conseguido produzir um poliuretano por um método a baixa temperatura. Depois, já em Wilmington, Paul Morgan, Stephanie Kwolek e outros investigadores, em colaboração, conseguiram muito mais. Os novos métodos vieram permitir uma enorme expansão da produção de alguns produtos e alargar a oferta de muitos outros com interesse comercial e industrial. Nesta gama, são de referir a fibra acrílica Orlon (PAN - poliacrilonitrilo), a fibra sintética de elevada elasticidade Spandex-Lycra (essencialmente PU - poliuretano) e, particularmente, o Nomex (*meta*-aramida), leve e flexível, muito resistente ao fogo e isolante térmico e elétrico, ideal para equipamentos usados por bombeiros e militares.

Figura 4 – Estruturas básicas do Orlon, do Nomex e do Spandex-Lycra.



Mas a sua descoberta “em primeiro lugar” ainda estava por vir. Nos anos 60, Stephanie Kwolek sintetizou um novo polímero, leve, forte e rígido, com propriedades que o tornavam único. Veio a chamar-se Kevlar e o seu uso no fabrico de coletes à prova de bala já salvou milhares de vidas.

4. Kevlar – um caso de acaso

Em 1964, o grupo de investigação de Kwolek tinha pela frente um novo desafio. O desenvolvimento das tecnologias de transporte associado a um forte mercado consumidor tinham fomentado o crescimento da indústria do petróleo. Havia, porém, uma forte possibilidade deste “ouro negro” vir a escassear. Mas, se fosse possível reforçar os pneus de automóveis, aviões e outros veículos com uma fibra muito resistente, mas significativamente mais leve do que o arame de aço, os veículos teriam maior rendimento com menos combustível. Além disso, a fibra criada tinha de resistir a temperaturas muito elevadas, por evidentes questões de segurança.

Foram muitas as combinações de reagentes que Kwolek fez e os polímeros que obteve. A sua aposta centrava-se nos polímeros aromáticos. A sua experiência anterior e as características do Nomex assim o determinavam. Depois de sintetizados, fundidos e fiados eram submetidos a testes a fim de determinar o seu peso, robustez e estiramento e se tendiam a quebrar facilmente. Dois polímeros aromáticos mostraram-se promissores: não fundiam. Era preciso encontrar um solvente para eles. Um deles, produzido por reação da *p*-fenilenodiamina com cloreto de tereftaloilo [12], apresentou um comportamento estranho. Ao invés de uma comum solução algo pastosa, translúcida ou transparente, obteve uma semelhante a água turva. Ao centrifugar a solução separaram-se duas camadas. Uma amarela, límpida, e outra opalescente. Seria possível passá-la à feira? Seria possível obter um fio? Facto era que, por filtração, tudo passava sem deixar rasto... “o fluxo certo e as propriedades de coesão desejáveis”, disse-nos Kwolek, “fio lindamente” [2]. Uma grande descoberta, com um potencial imediatamente reconhecível [1,13]. Corria o ano de 1965.

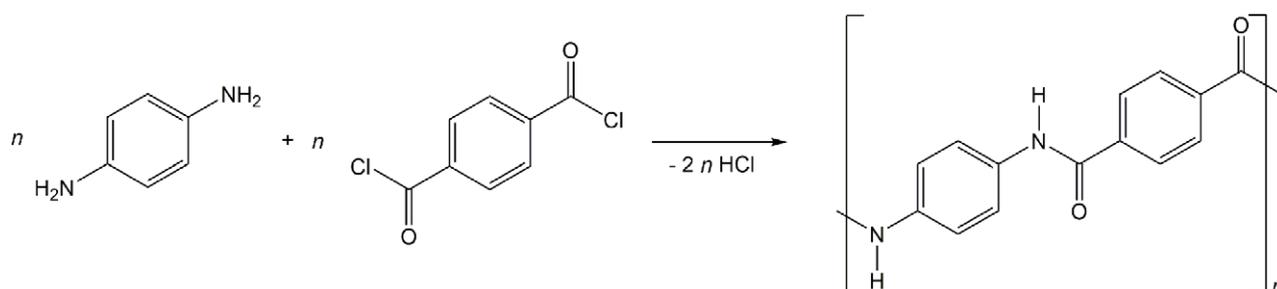


Figura 5 – Reação da 1,4-fenilenodiamina (*p*-fenilenodiamina) com cloreto de tereftaloilo, produzindo Kevlar.

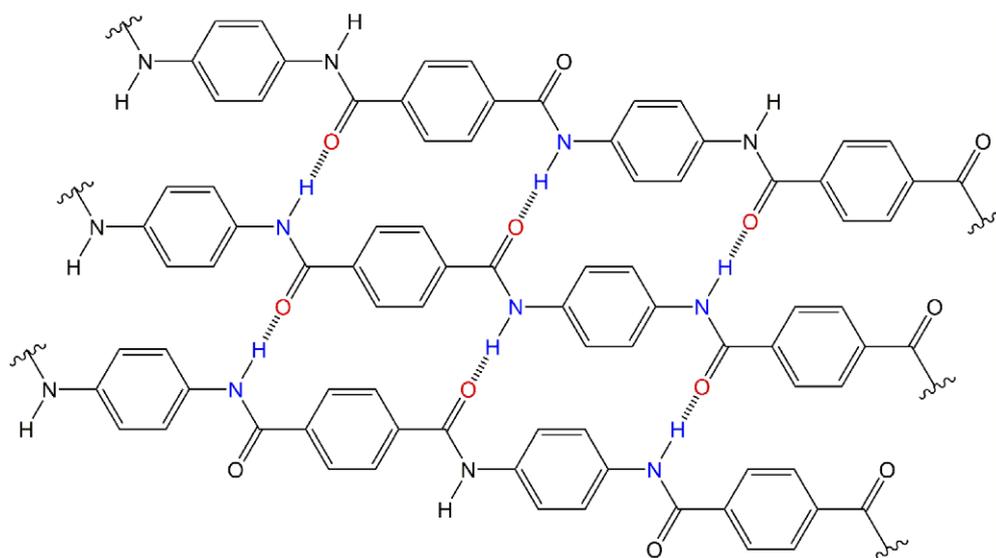


Figura 6 – Estrutura do Kevlar (poliparafeniloterftalamida).

No Kevlar, as moléculas de *p*-fenilenotereftalamida são constituídas por grupos fenilo, planares, ligados por grupos amida. As cadeias apresentam uma conformação *trans*, linear e rígida. Dispostas em camadas, como planos cristalográficos, a sua estrutura é estabilizada por ligações de hidrogénio entre as cadeias.

Seguiram-se os testes físicos. A nova fibra era muito forte e rígida, de uma enorme resistência ao calor e uma excelente prestação mecânica. A fibra aromática de poliamida, uma aramida, veio a chamar-se Kevlar. A sua descoberta foi, nas palavras de Stephanie Kwolek, “um caso de acaso...”.

Foram vários os cientistas que ficaram associados a esta descoberta: Paul W. Morgan, Thomas (Tom) I. Bair, Joseph (Joe) L. Rivers, Jr. e Herbert (Herb) Blades [14]. Ninguém teve dúvidas quanto à inovação introduzida no domínio dos polímeros. Mas, uma coisa é a escala laboratorial, outra a industrial... Entre vários problemas, a fição da fibra era tarefa extremamente exigente e delicada que, em grande escala, tornava a fibra inviável do ponto de vista económico. “Impossível, não se faz”, disse o economista da DuPont chamado a intervir. Mas fez-se. Desde o momento da descoberta até à venda do produto obtido, todavia, foram dez anos de esforço conjunto de um grupo de investigadores. A comercialização do produto muito deve à intervenção científico-tecnológica de Herbert Blades. Em 1975, o Kevlar era, finalmente, introduzido no mercado. Entretanto, foram muitas as patentes produzidas e muito poucos os artigos científicos publicados - qualquer informação podia ser útil para um concorrente [15,16]. O secretismo domina o mundo da química industrial, todos o sabem.

Ao Kevlar original, o K29, outros se sucederam: K49, 100, 119, 129... e outros polímeros de cristal líquido. Os polímeros de cristal líquido (*Liquid-crystal polymers*) - LCPs, são uma classe de polímeros aromáticos com características muito especiais. Estas superfibras apresentam alta resistência mecânica a temperaturas elevadas, são praticamente inertes à ação de produtos químicos (ácidos e bases fortes, cetonas e agressivos industriais), à chama e às intempéries. São estáveis em água fervente. Leves, mais leves e resistentes do que o aço! A sua aplicação primeira é, sem dúvida, em coletes, capacetes e luvas à prova de bala. Mas são também muito utilizadas em aplicações aeroespaciais e militares, na fabricação de peças de compósitos e como um substituto do asbesto (amianto). São vários os componentes do *space shuttle*, o vaivém espacial, que usaram Kevlar. E os cabos de suspensão das pontes. E as raquetes de ténis, canoas e skis. E os recipientes de gasolina dos carros de Fórmula 1. E...

5. O truque da corda de nylon

Como quase todos os químicos industriais, Stephanie Kwolek não é muito conhecida, mesmo entre os profissionais da química, em grande parte pelo secretismo atrás invocado. O artigo de Kwolek, em colaboração com Paul Morgan, mais citado foi publicado no *Journal of Chemical Education*, com o título “*The nylon rope trick: Demonstration of condensation polymerization*” [17]. Nele, os autores descrevem como um professor pode mostrar a polimerização por condensação aos seus jovens alunos, com pouco mais do que um gobelet, à pressão atmosférica e à temperatura ambiente - uma motivante experiência de introdução aos polímeros. Desde então, o ensaio tem sido efetivado em múltiplas escolas não só nos EUA, mas em todo mundo.

Figura 7 - Stephanie Kwolek e investigadores do grupo DuPont do Kevlar
Da esquerda para a direita: Herbert Blades, Paul Morgan e Joseph Rivers Jr.
Oferta de Stephanie Kwolek. © DuPont

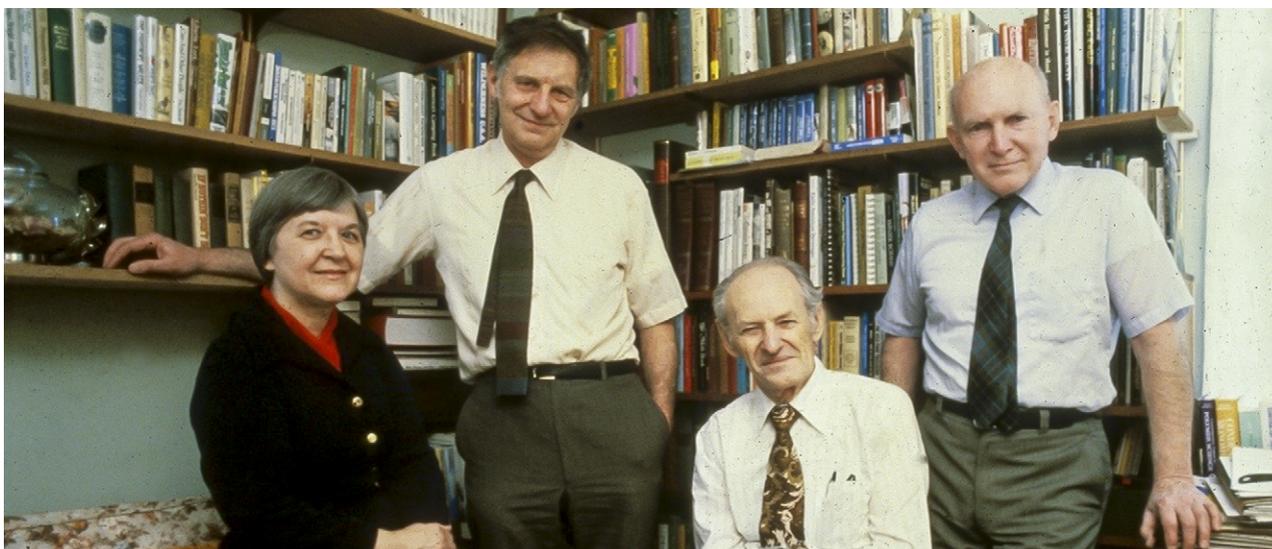
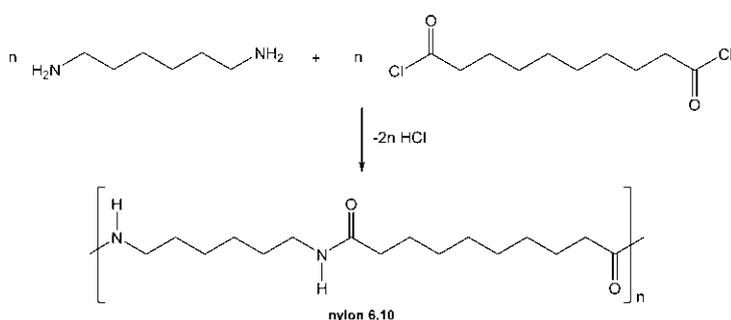


Figura 8 - Síntese do nylon 6,10.



6. Afundar ou nadar

Stephanie Kwolek era uma criança muito viva, que saltitava durante os mais de 3 km ida e volta, casa escola. No entanto, tinha um defeito na estrutura óssea de uma perna, possivelmente de origem genética, e ainda muito jovem teve de ser submetida a uma complicada operação cirúrgica; e, anos mais tarde, sofreu operação a um joelho. Desde cedo que Kwolek compreendeu que viver era “*sink or swim*”, “afundar ou nadar”, lema que conservou durante toda a vida.

Os tempos de estada de Stephanie Kwolek em Buffalo foram tempos de grande aprendizagem científica, mas também de descoberta pessoal. Kwolek era jovem e dinâmica. Rapidamente fez de colegas amigos e juntou mais alguns que frequentavam como ela as igrejas católica e presbiteriana. As atividades sociais e culturais preenchiam os seus fins de semana, sempre em alegre companhia: as caminhadas, a natação, o esqui, a patinagem, os piqueniques... e uns passos de dança – uma vida risonha e saudável. A partida para Wilmington foi de decisão difícil, para mais quando Kwolek antevia um casamento para sempre adiado.

Em termos culturais a transição foi um choque. Ao tempo, Buffalo era uma cidade com uma boa oferta de galerias de arte e salas de concerto; Wilmington, por seu turno, era provinciana e acanhada. No decurso dos anos, com a prestação da DuPont, Wilmington cresceu e tornou-se um lugar interessante para viver.



Figura 9 – Stephanie Kwolek recebe a National Medal of Technology das mãos do Presidente Bill Clinton (1996).

Depois da descoberta do Kevlar, Kwolek continuou a criar outras fibras sintéticas. E nunca se arrependeu de se ter enamorado da química e abandonado a ideia da medicina.

Reformou-se após 40 anos ao serviço da DuPont. Dedicou-se à costura e à jardinagem, à preparação de palestras de incentivo ao estudo da ciência. De vez em quando, um polícia batia-lhe à porta e dizia-lhe: “O Kevlar salvou a minha vida”. Kwolek sentia-se feliz por o destino a ter premiado com a descoberta de

um produto que beneficiava outras pessoas. Orgulhava-se dos prêmios que lhe tinham sido atribuídos. Faleceu em junho de 2014.

Stephanie Kwolek, em virtude da importância da descoberta da fibra Kevlar e do seu interesse industrial, recebeu o *ACS Award for Creative Invention* (1980) e a *Lavoisier Medal* atribuída pela DuPont (1995). No mesmo ano, o seu nome foi incluído na listagem *National Inventors Hall of Fame* (1995) e, dois anos depois, foi formalmente admitida no *Plastics Hall of Fame* (1997). Foi ainda premiada com a *National Medal*

of Technology and Innovation, Química (1996), o *IRI Achievement Award* (1997) instituído pelo Industrial Research Institute, Inc. e a *Perkin Medal* (1997) da responsabilidade da *Society of Chemical Industry* (EUA), entre outros. Em 2003 integrou *The National Women's Hall of Fame*.

Agradecimento

Ao *Hagley Museum and Library*, que tão generosamente permitiu a reprodução de fotografias da sua formidável coleção de arquivo.

Referências

- [1] Stephanie L. Kwolek, entrevista por Raymond C. Ferguson em Sharpley, Delaware, 4 maio 1986 (Philadelphia: Chemical Heritage Foundation, Oral History Transcript # 0028). <https://digital.sciencehistory.org/works/d217qq72t>
- [2] C. Howell, "Innovative Lives: Stephanie Kwolek and Kevlar®", The Wonder Fiber", Lemerson Center, 1996. <https://invention.si.edu/innovative-lives-stephanie-kwolek-and-kevlar-wonder-fiber>.
- [3] W. Iwańczak, "Kobieta, Która zatrzymała pociski. Nowe fakty (A mulher que parou as balas. Novos factos)", *Niedziela*, n.º 44 (2016). <https://tzn.edu.pl/static/uploaded/12a0cb5.pdf>
- [4] Stephen Kwolek terminou o curso de engenharia química na Universidade Carnegie Mellon após terminar a guerra para a qual fora destacado. Veio a integrar os laboratórios de investigação do Gulf Oil em Harmarville, Pensilvânia.
- [5] Kwolek só em 1959 foi promovida a *Research Chemist*, em 1967 a *Senior Research Chemist* e, finalmente, a *Research Associate* em 1974. "As mulheres da minha geração tinham muita dificuldade em serem promovidas na DuPont...", afirmou Stephanie Kwolek [1].
- [6] O *Textile Fibers Department* da DuPont foi instituído em 1936, sob a designação de *Rayon Department*. O novo nome surgiu em 1952, de forma a refletir a enorme variedade de fibras que iam sendo criadas. "Coleção "Dos Átomos e das Moléculas", vol. 7, Edições Colibri, Lisboa, 2019", *Química* 43 (2019) 50-55.
- [7] "I had just about all A's...", confidenciou Kwolek a R. C. Ferguson [1].
- [8] R. Gonçalves-Maia, "Wallace Carothers - Nylon, a primeira fibra sintética; Neopreno, a primeira borracha sintética", Edições Colibri, Lisboa, 2019
- [9] "Du Pont Textile Fibers Department Records, 1925-1970", Lemerson Center, 2014. <https://invention.si.edu/du-pont-textile-fibers-department-records-1925-1970>
- [10] "Paul W. Morgan, 1911-1992", em "Memorial Tributes: National Academy of Engineering", vol. 7, 1994, 149-152. <https://www.nap.edu/read/4779/chapter/31>.
- [11] D.A. Hounshell, J.K. Smith, Jr., "Science and Corporate Strategy: Du Pont R&D, 1902-1980", Cambridge University Press, Nova Iorque, 1995.
- [12] Ao invés do cloreto de tereftaloilo pode usar-se o ácido tereftálico, com libertação de moléculas de água.
- [13] C. Lefteri, "Materials for Design", Laurence King Publishing, Ltd, Londres, 2014.
- [14] "Interview with Herbert Blades, 2014 August 19", History of Kevlar oral history interviews, Hagley Digital Archives. https://digital.hagley.org/2014249_20140819_Blades#modal-close.
- [15] S. L. Kwolek, "Optically Anisotropic Aromatic Polyamide Dopes," U.S. Patent 3,671,542, emitida em 20 de junho de 1972 (pedido apresentado em 23 de maio de 1969).
- [16] S. L. Kwolek, "Wholly Aromatic Carbocyclic Polycarbonamide Fiber Having Orientation Angle of Less Than About 45°," U.S. Patent 3,819,587, emitida em 25 de junho de 1974 (pedido apresentado em 7 de setembro de 1971).
- [17] P.W. Morgan, S.L. Kwolek, "The nylon rope trick: Demonstration of condensation polymerization", *J. Chem. Educ.* **36** (1959) 182-184.

>

Raquel Gonçalves Maia

É Professora Catedrática aposentada da FCUL. Desenvolveu atividade de investigação na área da Química-Física. Dirigiu o Boletim SPQ e integrou a *Commission on Chemical Kinetics* da IUPAC. Foi colaboradora regular do JL – Jornal de Letras, Artes e Ideias. A Química, a História e a Filosofia das Ciências e a Literatura suscitaram o seu interesse. Tem centenas de artigos, 30 livros e alguns contos e romances publicados, em Portugal e no Brasil.

História e a Filosofia das Ciências e a Literatura suscitaram o seu interesse. Tem centenas de artigos, 30 livros e alguns contos e romances publicados, em Portugal e no Brasil.

rmcgonc@gmail.com

Doseamento do Açúcar em Bebidas Refrigerantes. Simples, Seguro e Sustentável!

>
Cristina Galacho

Determination of sugar content in soft drinks. Simple, Safe and Sustainable! *Soft drinks are one of the food products that most contribute to the intake of sugar by the Portuguese population, assuming the first position in teenagers. Facing such excessive consumption, it is essential to raise the awareness of the society, in general, and of young people, in particular, for this type of consumption and its potential risks! This article presents a practical laboratory work that aims to determine the amount of sugar in soft drinks. The main objectives are to promote the knowledge, skills and competences related to the measurement of masses and volumes, as basic operations in chemistry laboratories, as well as plotting graphs and fitting lines to experimental results. In addition, the work presented contributes to integrate Chemical education within the scope of the Green Chemistry paradigm and to promote reflection and action within the scope of the Sustainable Development Goals, proposed in the UN Agenda 2030, engaging students and promoting an active global citizenship, raising awareness of each one's role in building a safer, healthier and more sustainable world.*

As bebidas refrigerantes ou refrigerantes são um dos produtos alimentares que mais contribuem para a ingestão de açúcar pela população portuguesa, assumindo a primeira posição nos adolescentes. Perante um consumo tão excessivo, é fundamental aumentar a consciencialização da sociedade, em geral, e dos jovens, em particular, para este tipo de consumo e para os seus potenciais riscos! Neste artigo é apresentado um trabalho prático laboratorial que visa o doseamento do açúcar em bebidas refrigerantes. Os principais objetivos são promover a aprendizagem de conceitos e competências relativos à medição de massas e volumes, enquanto operações basilares em Química Laboratorial, e o traçado de gráficos e de curvas de ajuste aos resultados experimentais. O trabalho apresentado contribui ainda para integrar o ensino da Química no âmbito do paradigma da Química Verde e para promover a reflexão e ação no âmbito dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, propostos na Agenda 2030 da ONU, envolvendo os estudantes e promovendo uma cidadania global ativa, e uma maior consciencialização do papel de cada um na construção de um mundo mais seguro, mais saudável e mais sustentável.

Introdução

As bebidas refrigerantes ou refrigerantes¹ são um dos produtos alimentares que mais contribuem para a ingestão de açúcar pela população portuguesa, assumindo a primeira posição nos adolescentes [1-3]. Na Tabela 1 apresenta-se o contributo destas bebidas para a ingestão de açúcar pela população portuguesa

em geral, pelas crianças com idades compreendidas entre os 5 e os 9 anos e pelos adolescentes dos 10 aos 17 anos, expresso em percentagem. Mostra-se ainda a posição que ocupam no *ranking* dos produtos alimentares que mais contribuem para a referida ingestão [1-3].

Tabela 1 - Contributo das bebidas refrigerantes para a ingestão de açúcar na população portuguesa, em geral, nas crianças (5-9 anos) e nos adolescentes (10-17 anos) e posição que ocupam no ranking dos produtos alimentares que mais contribuem para a referida ingestão [1-3].

População Portuguesa	Crianças 5-9 anos	Adolescentes 10-17 anos
11,8%	16,9%	24,6%
# 3	# 2	# 1

De acordo com o relatório de 2019 do Programa Nacional para a Promoção da Alimentação Saudável, PNPAS, da Direção Geral da Saúde, DGS, em 2017, primeiro ano de aplicação do imposto especial de consumo sobre as bebidas adicionadas de açúcar e outros edulcorantes, cada português consumiu 75 litros de bebidas refrigerantes, o equivalente a 5,2 quilogramas de açúcar. Em 2018, o consumo *per capita* foi de 60 litros, correspondente a 4,0 quilogramas de açúcar (Tabela 2). O decréscimo verificado pode estar relacionado com uma mudança dos padrões de consumo dos portugueses ou com a reformulação dos referidos produtos [1-3]. Contudo, o mesmo documento revela ainda que entre fevereiro e abril de 2019 houve um aumento de 4% nas vendas de bebidas refrigerantes relativamente ao período homólogo de 2018, sendo prematuro afirmar que há uma tendência generalizada para a diminuição deste tipo de consumo [1-3]. Considerando o consumo por tipo de bebida, as colas assumem a liderança como as bebidas refrigerantes mais consumidas (40%), seguidas dos sumos com gás (20%), das bebidas à base de chá (15%) e das bebidas de lima-limão (10%) [2].

Tabela 2 - Consumo, *per capita*, de bebidas adicionadas de açúcar ou edulcorantes, e de açúcar livre através destas bebidas, em 2017 e 2018 [1-3].

Consumo <i>per capita</i>	2017	2018
Bebidas refrigerantes	75 L	60 L
Açúcar	5,2 kg	4,0 kg

O açúcar presente nas bebidas refrigerantes, como um dos principais ingredientes, é a sacarose. A sacarose, $C_{12}H_{22}O_{11}$, é um hidrato de carbono (ou glúcido) composto por uma molécula glucose e uma de frutose, Figura 1. O nome sistemático IUPAC é 2-[3,4-di-hidroxi-2,5-bis(hidroximetil) tetra-hidrofuran-2-il]oxi-6-(hidroximetil) oxano-3,4,5-triol. É um sólido cristalino branco muito solúvel em água (1970 g/L a 20,0 °C). Está presente, de forma natural e em abundância, na cana-de-açúcar e na beterraba e é utilizada como aditivo em vários produtos alimentares processados [4]. Apresenta um sabor doce, o que a torna extremamente sedutora!

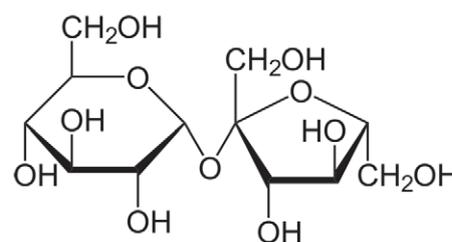


Figura 1 - Fórmula de estrutura da sacarose.

Na Figura 2 apresenta-se uma infografia relativa ao teor de açúcar (e gordura) adicionado a alguns alimentos e bebidas presentes no nosso quotidiano, incluindo o das duas bebidas refrigerantes mais consumidas em Portugal [5]. A exibição desta infografia permite uma rápida sensibilização dos estudantes para o assunto em causa.

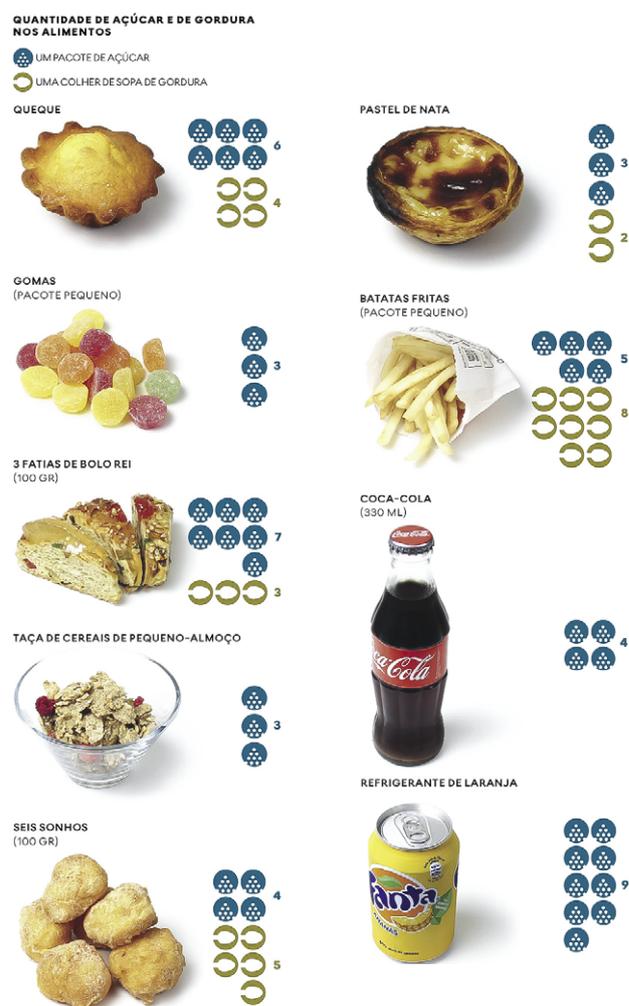


Figura 2 - Teor de açúcar (e gordura) adicionado a alguns alimentos e bebidas presentes no nosso quotidiano. Créditos: Jornal Expresso. Adaptado de [5]. Nota da autora: de acordo com o SI de unidades, GR e ML devem ser substituídos, respetivamente, por g e mL.

De acordo com a recomendação da Organização Mundial da Saúde, OMS, o consumo de açúcares simples adicionados aos produtos alimentares deve estar abaixo dos 10% da energia consumida diariamente. De preferência deve aproximar-se dos 5% [3]. Por exemplo, um adulto que consome 2000 kcal por dia não deve ultrapassar as 200 kcal/dia de açúcares. Cada grama deste hidrato de carbono contém 4 kcal [6], logo, o consumo de açúcares deve ser, no máximo, de 50 gramas por dia, o equivalente a 12,5 pacotes. Refira-se que a partir de janeiro de 2020 a quantidade máxima permitida por pacote de açúcar é 4 gramas [7]. Consumir açúcar estimula o cérebro a produzir serotonina, neurotransmissor responsável pela sensação de bem-estar e prazer. No entanto, ao provocar a sensação de bem-estar e prazer, cria dependência [8,9]. Uma dieta rica em açúcar aumenta o risco de saúde dado que potencia, entre outros, o excesso de peso e a obesidade (considerada uma questão de saúde pública), doenças crónicas como a diabetes tipo 2 e a ocorrência de cáries dentárias. Na Figura 3 apresenta-se uma infografia relativa às consequências do consumo de açúcar em excesso no organismo humano [9]. A exibição desta infografia permite, mais uma vez, uma rápida sensibilização dos estudantes para o assunto em causa.

Perante um consumo tão excessivo de bebidas refrigerantes em Portugal é fundamental aumentar a consciencialização da sociedade, em geral, e dos jovens, em particular, para este tipo de consumo e para os seus potenciais riscos! *Dosear para Consciencializar* e reduzir o consumo no dia-a-dia!

Descrição global do trabalho prático laboratorial

O trabalho prático laboratorial apresentado permite aos estudantes de 1.º ciclo das Licenciaturas em Química e afins dosear o teor de açúcar em bebidas refrigerantes, consciencializando para este tipo de consumo e para os seus potenciais riscos! Os objetivos principais são promover a aprendizagem de conceitos e competências relativos à medição de massas e volumes, enquanto operações basilares em Química Laboratorial, o traçado de gráficos e ajuste de funções lineares aos resultados experimentais utilizando uma folha de cálculo do tipo *Microsoft Office Excel*. Em sentido mais lato, pretende-se introduzir os estudantes na temática da Química Verde e promover a reflexão e ação no âmbito dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, propostos na Agenda 2030 da Organização das Nações Unidas, ONU.

Este trabalho foi planeado para a unidade curricular Técnicas e Métodos de Laboratório I, TML1, do 1.º semestre das licenciaturas em Química, Bioquímica, Biotecnologia e Biologia Humana da Universidade de Évora. Tem a duração total de 180 minutos, dos quais cerca de 120 são destinados à realização do procedimento experimental, efetuado por grupos de três estudantes. O número ideal de grupos por turma é de 4 (12 estudantes), podendo ir até aos 5 (15 estudantes) dependendo das dimensões do laboratório e do número de balanças analíticas e/ou semi-analíticas disponíveis. Tal como foi anteriormente referido é recomendado para estudantes universitários do 1.º ano de Licenciaturas em Química e afins, podendo também ser realizado pelos alunos do Ensino Secundário do Curso científico-humanístico de Ciências e Tecnologias, que frequentem a disciplina de Física e Química A. Permite a abordagem de diferentes conteúdos programáticos, nomeadamente “Soluções, colóides e suspensões”, “Composição quantitativa de soluções”, “Traçado de gráficos e de curvas de ajuste aos dados experimentais” e “Química Verde” [10]. Adicionalmente, estes jovens integram a faixa etária em que a prevalência do consumo de bebidas refrigerantes é mais elevada.



Figura 3 - Consequências do consumo de açúcar em excesso no organismo humano. Créditos: CUF Mais Saúde [9].

Protocolo Experimental

1. Amostras a analisar

Bebidas refrigerantes (previamente desgaseificadas por agitação mecânica, à temperatura ambiente):

- Lipton Ice Tea limão (4,5 g de açúcar/100 mL).
- Seven Up (7,3 g de açúcar/100 mL).
- Coca-Cola sabor original (10,6 g de açúcar/100 mL).

2. Reagentes e solventes

- Açúcar comercial (Sidul, fino) previamente seco na estufa, a uma temperatura de 50-60°C, e arrefecido em exsecador.
- Água destilada.

3. Equipamento

- Balança semi-analítica (Mettler Toledo, PB 303).

4. Procedimento experimental [11]

4.1. Elaboração da curva de calibração

4.1.1. Preparação das soluções padrão

- Colocar um copo na balança e efetuar a tara.
- Pesar, no copo e de forma rigorosa, a massa de açúcar necessária para preparar 50 mL de cada uma das soluções padrão indicadas na Tabela 3.
- Adicionar água destilada.
- Agitar, com auxílio de vareta de vidro, até dissolução completa.
- Transferir para o balão volumétrico de 50 mL com o auxílio de uma vareta e de um funil de vidro.
- Passar o copo e a vareta por água destilada e transferir para o balão volumétrico. Perfazer, no balão volumétrico, os 50 mL com água destilada.
- Homogeneizar e identificar a solução.

Nota: A operação de pesagem do soluto deve ser realizada num copo (e não num vidro de relógio) para minimizar os erros relativos à preparação das soluções padrão e permitir a obtenção de uma curva de calibração com um elevado valor de R^2 .

Tabela 3 - Concentração das soluções padrão de açúcar e massas de açúcar necessárias para preparar 50 mL de cada solução.

Solução Padrão	[Açúcar] % (m/V)	m Açúcar g
1	3,0	1,500
2	6,0	3,000
3	9,0	4,500
4	12,0	6,000
5	15,0	7,500
6	18,0	9,000

4.1.2. Determinação da densidade do solvente

- Colocar um copo na balança e efetuar a tara.
- Medir rigorosamente, com uma pipeta volumétrica, 10,0 mL de solvente e transferir para o copo.
- Registrar o valor de massa obtido.
- Efetuar, pelo menos, mais 2 ensaios (até à obtenção de 3 valores concordantes).

4.1.3. Determinação da densidade das soluções padrão

- Para cada uma das soluções padrão proceder de modo análogo ao indicado em 4.1.2.

4.2. Determinação da densidade das bebidas refrigerantes

- Para cada uma das bebidas refrigerantes a analisar proceder de modo análogo ao indicado em 4.1.2.

5. Tratamento de resultados

- Calcular a concentração das soluções padrão de açúcar preparadas, expressa em percentagem massa volume.
- Calcular a densidade do solvente e das soluções padrão de açúcar, expressa em g/mL.
- Traçar a curva de calibração densidade *versus* concentração das soluções padrão de açúcar.
- Considerar a gama da curva de calibração onde a resposta da densidade *versus* concentração é linear. Determinar os parâmetros da equação de calibração linear.
- Apresentar a equação que relaciona densidade e concentração em açúcar.
- Determinar o teor de açúcar, expresso em percentagem massa volume, das bebidas refrigerantes analisadas e comparar com os valores do rótulo.

Resultados e discussão

Elaboração da curva de calibração

Para a elaboração da curva de calibração foram preparadas 5 soluções padrão de açúcar em água destilada, de concentração 3,0, 6,0, 9,0, 12,0, 15,0 e 18,0% (m/V), por pesagem direta do soluto. A determinação do valor de densidade do solvente e de cada uma destas soluções foi efetuada por medidas de massa e de volume. Na Tabela 4 apresentam-se os valores de concentração das soluções padrão de açúcar, expressos em percentagem massa volume (% m/V), e os respetivos valores de densidade, expressos em g/mL.

Tabela 4 - Concentração das soluções padrão de açúcar e valores médios de densidade do solvente e das soluções padrão.

	[Açúcar] % (m/V)	Densidade g/mL
Solvente	0	0,9901
Solução padrão 1	3,0	1,0023
Solução padrão 2	6,0	1,0135
Solução padrão 3	9,0	1,0238
Solução padrão 4	12,0	1,0348
Solução padrão 5	15,0	1,0476
Solução padrão 6	18,0	1,0584

A reta de calibração para a determinação do teor de açúcar em bebidas refrigerantes apresenta-se na Figura 4.

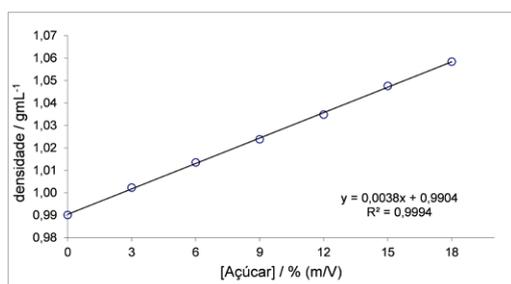


Figura 4 - Reta de calibração para a determinação do teor de açúcar em bebidas refrigerantes.

A análise dos resultados obtidos, por regressão linear simples, permitiu estabelecer a equação 1, que relaciona densidade e concentração em açúcar (sacarose). A relação linear é válida para a gama de concentrações estudadas, 0-18% (m/V), e na qual se inserem os valores percentagem de açúcar das bebidas refrigerantes analisadas.

$$\text{Densidade} = 0,0038 [\text{Açúcar}] + 0,9904 \quad (1)$$

Determinação do teor em açúcar nas bebidas refrigerantes analisadas

Na Tabela 5 apresentam-se as principais características das bebidas refrigerantes analisadas e os valores de densidade determinados a partir das medidas experimentais de massa e de volume. Com base na equação 1 e nos valores médios de densidade obtidos para as bebidas refrigerantes analisadas, determinou-se o teor em açúcar expresso em percentagem massa volume, tendo-se obtido 4,7% para o Lipton Ice Tea, 8,2% para a 7Up e 11,7% para a Coca-Cola. A expressão dos

resultados em percentagem massa volume permite a comparação direta com os valores constantes nos rótulos das bebidas refrigerantes analisadas e apresentados na Tabela 5. Tal como seria expectável, os valores obtidos experimentalmente são ligeiramente superiores aos rotulados, + 4,4% para o Lipton Ice Tea, + 11,2% para a 7Up e + 10,4% para a Coca-Cola, dado que o método apresentado não é específico para a determinação de açúcar [11]. Os desvios positivos observados são principalmente devidos aos outros constituintes dos refrigerantes como, os acidificantes, os aromatizantes naturais e artificiais, os reguladores de acidez, os conservantes, os corantes e o sal, que não foram tidos em consideração na preparação das soluções padrão, e que influenciam os valores de densidade das bebidas analisadas.

Tabela 5 - Bebidas refrigerantes analisadas, teores de hidratos de carbono (g/100 mL) expressos nos rótulos e valores médios de densidade determinados experimentalmente.

Bebida	Tipo	Marca	Hidratos de carbono g/100 mL	Densidade g/mL
1	Chá gelado	Lipton	4,5	1,0082
2	Lima-Limão	Seven Up (7Up)	7,3	1,0217
3	Cola	Coca-Cola	10,6	1,0350

Segurança e sustentabilidade

O trabalho laboratorial apresentado constitui um excelente exemplo em que se alia segurança e sustentabilidade. O soluto e solvente usados, respetivamente, açúcar comercial (sacarose) e água destilada, são substâncias classificadas como não perigosas de acordo com o CLP (Regulamento CE nº1272/2008 do parlamento Europeu e do Conselho relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas) [12,13]. Analogamente, as amostras a analisar, bebidas refrigerantes, também podem ser consideradas como não perigosas. As etapas experimentais a realizar, durante a execução experimental, são simples e de perigosidade reduzida, o que implica um risco laboratorial diminuto.

O trabalho laboratorial apresentado pretende contribuir para integrar o ensino da Química no âmbito do paradigma da Química Verde, QV², nomeadamente, nos 12 Princípios da Química Verde³, PQV. Segundo D. A. Costa *et al.* [14] o principal objetivo do ensino da química segundo este paradigma é preparar os alunos, futuros cidadãos, para compreender e contribuir para o Desenvolvimento Sustentável. Ainda de acordo com os mesmos autores, a inclusão da QV no processo de ensino-aprendizagem implica desafios para os

professores de todos os níveis de ensino, que têm de incorporar no seu ensino novos conceitos e objetivos verdes, de forma a permitirem aos seus alunos uma visão inovadora da Química. Recentemente o efeito sinérgico do ensino da Segurança Laboratorial e da Química Verde tem vindo a ser defendido por instituições de renome internacional, como a *American Chemical Society*, e por diferentes autores [15-17] como uma mais valia para o aumento do conhecimento e das competências dos estudantes de Química nas suas atividades em Laboratórios e para o seu futuro, em profissões que envolvam a Química [17]. Na Tabela 6 apresentam-se os enunciados dos PQV que podem ser mencionados com base no trabalho laboratorial apresentado [18,19].

Tabela 6 - Enunciados dos PQV que podem ser mencionados com base no trabalho laboratorial apresentado [18, 19].

PQV 1	Prevenção É melhor prevenir a formação de resíduos do que ter de tratá-los, depois de se terem criado, para eliminar as suas propriedades tóxicas.
	Os potenciais “resíduos” produzidos neste trabalho prático são o açúcar (sacarose), as soluções aquosas de açúcar e as amostras de refrigerantes analisadas. A sacarose é considerada uma substância não perigosa de acordo com o Regulamento CLP [12,20]. Assim, o descarte desta substância tal como a eliminação das suas soluções aquosas, não causam o mínimo impacto negativo nem na saúde humana/animal nem no meio ambiente.
PQV 5	Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras O uso de substâncias auxiliares (solventes, agentes para promover separações, etc.) deve ser evitado sempre que possível; quando usados, esses agentes devem ser inócuos.
	A solução mais verde é a não utilização de solventes (<i>the best solvent is no solvent!</i>). Quando tal não é viável, o solvente preferencial é a água dado que é totalmente inócuo. Neste trabalho prático laboratorial é utilizada a água como solvente, o que está em consonância o PQV enunciado.
PQV 7	Uso de matérias primas renováveis Sempre que for técnica e economicamente praticável, devem-se usar matérias primas e recursos renováveis de preferência a não renováveis.
	O soluto, açúcar (sacarose), e o solvente, água, envolvidos podem ser considerados como renováveis e/ou provenientes de matérias primas renováveis. Saliente-se que a sacarose é proveniente de matérias primas renováveis, nomeadamente, da cana-de-açúcar e da beterraba.
PQV 12	Química inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes As substâncias usadas e as formas da sua utilização nos processos químicos de fabrico devem minimizar o potencial de ocorrência de acidentes químicos, tais como fugas, explosões e incêndios.
	A sacarose, tal como já foi referido, é considerada uma substância não perigosa de acordo com o Regulamento CLP [12,20] apresentando um risco de acidente químico praticamente nulo.

Em 2016 a Organização das Nações Unidas, ONU, lançou uma agenda com 17 Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, ODS, desdobrados em 169 metas, que se esperam alcançar até final de 2030. Trata-se de uma agenda alargada e ambiciosa que aborda as três dimensões do desenvolvimento sustentável: social, económica e ambiental, bem como importantes questões relacionadas com a paz, a justiça e instituições eficazes [21]. Em 2020, cinco anos após o lançamento e a uma década de distância de 2030, a maioria dos estudantes universitários que frequentaram a unidade curricular TML1 desconhecia ou não tinha um conhecimento preciso sobre a referida agenda. Assim, o trabalho laboratorial apresentado pretende ainda contribuir para a disseminação, reflexão e ação no âmbito dos ODS propostos na Agenda 2030 da Organização das Nações Unidas [21]. Na tabela 7 apresentam-se os ODS e as metas que fazem referência direta a “Químicos perigosos” e “Produtos Químicos” que podem ser mencionados com base no trabalho laboratorial apresentado.

Tabela 7 - Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, ODS, propostos na Agenda 2030 da Organização das Nações Unidas que podem ser mencionados com base no trabalho laboratorial apresentado [21].

3 SAÚDE DE QUALIDADE	ODS 3. Saúde de Qualidade Garantir o acesso à saúde de qualidade e promover o bem-estar para todos em todas as idades. Meta: Até 2030, reduzir substancialmente o número de mortes e doenças devido a químicos perigosos, contaminação e poluição do ar, da água e do solo. Neste trabalho laboratorial não são utilizados “químicos perigosos” e consequentemente não há contaminação nem poluição do ar, da água e do solo.
6 ÁGUA POTÁVEL E SANEAMENTO	ODS 12. Água Potável e Saneamento Garantir a disponibilidade e a gestão sustentável da água potável e do saneamento para todos. Meta: Até 2030, melhorar a qualidade da água, reduzindo a poluição, eliminando os despejos e minimizando a libertação de produtos químicos e materiais perigosos, reduzindo para metade a proporção de águas residuais não tratadas e aumentando substancialmente a reciclagem e a reutilização ao nível global. Nos despejos efetuados é libertada sacarose, substância degradável e não perigosa de acordo com o Regulamento CLP [12,20].
12 PRODUÇÃO E CONSUMO SUSTENTÁVEIS	ODS 12. Produção e Consumo Sustentáveis Garantir padrões de consumo e de produção sustentáveis. Meta: Até 2020, alcançar uma gestão ambientalmente saudável dos produtos químicos e de todos os resíduos, ao longo de todo o ciclo de vida destes, de acordo com as normas internacionais acordadas e reduzir significativamente a libertação destes para o ar, água e solo, minimizando os seus impactos negativos para a saúde humana e o meio ambiente. A libertação “dos produtos químicos” usados não causa impactos negativos para a saúde humana e o meio ambiente.

Conclusões

O trabalho prático laboratorial proposto permite aos estudantes de 1.º ciclo das Licenciaturas em Química e afins, e aos do ensino secundário do Curso científico-humanístico de Ciências e Tecnologias, determinar o teor de açúcar em bebidas refrigerantes, consciencializando para este tipo de consumo e para os seus potenciais riscos. Os resultados experimentais obtidos para três das bebidas refrigerantes mais consumidas em Portugal, nomeadamente, Lipton Ice Tea, 7Up e Coca-Cola, são ligeiramente superiores aos valores apresentados nos respetivos rótulos dado que o método apresentado não é específico para a determinação deste ingrediente. No entanto, a realização deste trabalho prático laboratorial proporciona o conhecimento da quantidade de açúcar contido em cada uma das bebidas refrigerantes analisadas e a sensibilização para o facto da ingestão de uma lata de 330 mL de Lipton Ice Tea, 7Up e Coca-Cola, corresponder, respetivamente, a 3, 5 e 7% da dose diária de referência (DR) para um adulto médio. Permite ainda concluir que a bebida refrigerante mais consumida a nível nacional, e também a nível mundial, é a que apresenta um teor em açúcar mais elevado.

Para além da consecução dos objetivos específicos inerentes ao trabalho prático laboratorial apresentado, salienta-se a importância da introdução



ODS 4. Educação de Qualidade

Garantir o acesso à educação inclusiva, de qualidade e equitativa, e promover oportunidades de aprendizagem ao longo da vida para todos.

Meta: Até 2030, garantir que todos os alunos adquiram conhecimentos e competências necessárias para promover o desenvolvimento sustentável, inclusive, através da educação para o desenvolvimento sustentável e estilos de vida sustentáveis, direitos humanos, igualdade de género, promoção de uma cultura de paz e de não violência, cidadania global, valorização da diversidade cultural e da contribuição da cultura para o desenvolvimento sustentável.

de conceitos fundamentais relativos a temáticas atuais como a Segurança, Química Verde e Agenda 2030 da Organização das Nações Unidas para o Desenvolvimento Sustentável.

Numa perspetiva global pode concluir-se que o trabalho apresentado contribui para que os estudantes adquiram conhecimentos e competências necessários para promover o desenvolvimento sustentável e para adotarem estilos de vida mais saudáveis, o que está em linha com o ODS 4, relativo à Educação de Qualidade.

Notas

¹ Bebida Refrigerante ou Refrigerante

De acordo com a Portaria n.º 703/96, publicada no Diário da República n.º 282/1996, Série I-B de 1996-12-06, entende-se por bebida refrigerante ou refrigerante o líquido constituído por água contendo em solução, emulsão ou suspensão qualquer dos ingredientes aí previstos e eventualmente aromatizado e ou gaseificado com dióxido de carbono. As denominações dos refrigerantes incluem:

- Refrigerante de sumo de frutos
- Refrigerantes de polme
- Refrigerante de extratos vegetais
- Refrigerante aromatizado
- Água tónica
- Refrigerante de soda
- Refrigerante adicionado de bebida alcoólica

Para mais informações consultar a referida portaria em:

<https://dre.pt/pesquisa/-/search/186297/details/maximized> (acedido 19/02/2020).

² Química Verde

Química Verde pode ser definida como “conceção, desenvolvimento e implementação de produtos químicos e processos que permitam reduzir ou eliminar o uso e a geração de substâncias perigosas” [18,19].

³ Os 12 Princípios da Química Verde

Formulados por Paul Anastas e John Warner em 1998 e publicados originalmente em “*Green Chemistry - Theory and Practice*” constituem o conjunto de princípios a perseguir quando se pretende implementar a QV numa indústria ou instituição de ensino e/ou em pesquisa na área da química. Descrevem em linhas gerais como se pode atuar sobre um processo ou produto de forma a minimizar o impacto no meio ambiente [18,19].

Referências

- [1] Programa Nacional para a Promoção da Alimentação Saudável (PNPAS). Direção-Geral da Saúde (DGS) 2019. <https://www.alimentacaosaudavel.dgs.pt/modificacao-da-oferta-alimentar/medidas-fiscais/> (acedido em 16/02/2020).
- [2] Relatório do Programa Nacional para a Promoção da Alimentação Saudável (PNPAS). Direção-Geral da Saúde (DGS) Direção-Geral da Saúde 2019 Lisboa. <https://www.dgs.pt/documentos-e-publicacoes/programa-nacional-para-a-promocao-da-alimentacao-saudavel-relatorio-2019.aspx> (acedido em 16/02/2020).
- [3] O desafio de reduzir o consumo de açúcar no dia-a-dia. Direção-Geral da Saúde (DGS). <https://www.dgs.pt/em-destaque/o-desafio-de-reduzir-o-consumo-de-acucar-no-dia-a-dia.aspx> (acedido em 16/02/2020).
- [4] João Rodrigues. *A molécula da semana: A Sacarose*. Faculdade de Ciências. Artigo publicado em 20/12/2012. <https://www.fciencias.com/2012/12/20/molecula-da-semana-sacarose-2/> (acedido em 16/02/2020).
- [5] *Crianças comem 20 pacotes de açúcar por dia*. Jornal Expresso online. Edição de 17/05/2017. <https://expresso.pt/sociedade/2017-05-17-Crianças-comem-20-pacotes-de-acucar-por-dia> (acedido em 16/02/2020).
- [6] Cristina Galacho. *As Temíveis Calorias*. Jornal Diário do Sul. Edição de 26/7/2007. Disponível on-line no blogue *Química para Todos*. <http://quimicaparatodosuevora.blogspot.com/2011/01/as-temiveis-calorias.html> (acedido em 16/02/2020).
- [7] *Nova redução de gramagem nos pacotes de açúcar*. Jornal de Notícias online. Edição de 18/07/2018. <https://www.jn.pt/nacional/nova-reducao-de-gramagem-nos-pacotes-de-acucar-9609507.html> (acedido em 16/02/2020).
- [8] *Quantas gramas de açúcar por dia?* Sapo Lifestyle Saúde. Artigo publicado em 10/03/2014. <https://lifestyle.sapo.pt/saude/peso-e-nutricao/artigos/quantos-gramas-de-acucar-por-dia> (acedido em 16/02/2020).
- [9] *Açúcar em excesso: o que faz ao seu corpo*. CUF Mais Saúde. Artigo publicado em 23/07/2014. <https://www.saudecuf.pt/mais-saude/artigo/acucar-em-excesso-o-que-faz-ao-seu-corpo> (acedido em 16/02/2020).
- [10] Programa de Física e Química A. 10.º e 11.º anos. Curso científico-humanístico de Ciências e Tecnologias. Ministério da Educação e Ciência 2014. <https://www.dge.mec.pt/fisica-e-quimica-0> (acedido em 19/02/2020).
- [11] S. K. Henderson, C. A. Fenn, J. D. Domijan, *J. Chem. Educ.* **75** (1998) 1112-1113.
- [12] Regulamento (CE) N.º 1272/2008 do Parlamento Europeu e do Conselho e 16 de dezembro de 2008 relativo à classificação, rotulagem e embalagem de substâncias e misturas, que altera e revoga as Directivas 67/548/CEE e 1999/45/CE, e altera o Regulamento (CE) n.º 1907/2006. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/PT/TXT/?uri=CELEX%3A32008R1272> (acedido 16/02/2020).
- [13] Cristina Galacho, *BSPQ* **138** (2015) 47-56.
- [14] Dominique A. Costa, M. Gabriela, T. C. Ribeiro, Adélio A. S. C. Machado *BSPQ* **115** (2009) 41-49.
- [15] ACS webinar Webinar “How Sustainable Chemistry is Safer Chemistry” American Chemical Society. (participação da autora em 19/07/2018).
- [16] “Safety in Academic Chemistry Laboratories – Best Practices for first and second year University Students” American Chemical Society, 8th Ed, Washington, 2017. <https://www.acs.org/content/acs/en/about/governance/committees/chemicalsafety/publications.html> (acedido 16/02/2020).
- [17] Adélio A. S. C. Machado, *BSPQ* **148** (2018) 47-58.
- [18] P. T. Anastas, J. C. Warner “Green Chemistry – Theory and Practice” Oxford U.P., Oxford, 1998.
- [19] Adélio A. S. C. Machado, *BSPQ* **95** (2004) 59-67.
- [20] Ficha de dados de segurança da Sacarose – Merck (acedido em 16/02/2020).
- [21] Guia sobre Desenvolvimento Sustentável. <https://unric.org/pt/objetivos-de-desenvolvimento-sustentavel/> (acedido em 20/01/2020).

>

Cristina Galacho

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

pcg@uevora.pt

CIÊNCIA ID: 5516-15D2-AA6D.

Aplicações de Jogos que Podem ser Usados como Recursos Educativos no Ensino da Química Orgânica

>
Custódia Fonseca*
Marielba Zacarias

Game apps that can be used as educational resources in teaching organic chemistry.

Organic Chemistry is a topic where many students demonstrate learning difficulties, being also a discipline with a high failure in the case of higher education. The use of active learning methods can be a strategy to motivate students in its study. This includes the use of educational games, namely games apps that have organic chemistry as a theme. This article aims to make a non-exhaustive systematization of game apps that can be very useful in teaching organic chemistry in and outside the classroom, whether in secondary or higher education.

Os alunos em geral demonstram dificuldades na aprendizagem dos tópicos de química orgânica, sendo esta uma disciplina com elevado insucesso escolar no caso do ensino superior. O uso de métodos de aprendizagem ativa poderá ser uma estratégia para motivar os alunos para o seu estudo/aprendizagem. Inclui-se neste âmbito a utilização de jogos educativos, nomeadamente as aplicações de jogos que têm a química orgânica como temática. Este artigo tem como objetivo fazer uma sistematização, não exaustiva, de aplicações de jogos que podem ser muito úteis no ensino da química orgânica em sala de aula, ou fora dela, quer no ensino secundário quer no ensino superior.

Introdução

A aprendizagem ativa tem sido considerada como uma estratégia promissora para melhorar os resultados obtidos na sala de aula, em particular no contexto da química orgânica [1]. Por método de aprendizagem ativa entende-se qualquer método de instrução que ativamente envolve os alunos no seu processo de aprendizagem em oposição à passividade de apenas assistir a uma aula. Ou seja, os alunos são encorajados não apenas a ouvir e ver, mas também a falar, ler e como consequência a refletir nos conteúdos, questionando-se e clarificando, processo que intensifica a aquisição de conhecimentos.

Os jogos providenciam uma abordagem interessante à aprendizagem ativa dado que juntam a construção do conhecimento utilizando uma atividade lúdica a uma alegre competição. O sucesso desta estratégia pode ser confirmado pelo aumento do número de jogos que são utilizados para ensinar diferentes tópicos, como por exemplo, a tabela periódica [2], química geral [3], química orgânica [4-6], grupos funcionais [4], síntese química [7,8], entre outros.

Os jogos podem ser classificados de acordo com o tema da matéria que tratam (esta classificação foi feita no parágrafo anterior), ou pela forma como se

apresentam (jogo de tabuleiro, jogo de cartas, jogo de dados, puzzles e jogos eletrônicos) [9].

Embora o uso de telemóveis na sala de aula seja ainda controverso, o seu potencial no ensino da química tem vindo a ser demonstrado nos últimos anos. O uso alargado de *smartphones* pelos alunos [10,11], bem como de outros aparelhos eletrónicos portáteis, como computadores e *tablets*, constitui uma excelente oportunidade para utilizar aplicações de jogos com fins educativos promovendo deste modo a interatividade entre os alunos e entre os alunos e o professor.

O presente artigo tem como objetivo fazer uma revisão sistemática destas aplicações que têm como temática a química orgânica e que podem ser usados em sala de aula ou fora dela, quer no ensino secundário quer no ensino superior. Salienta-se que esta revisão não é exaustiva, mas apenas focada nas aplicações, que para as autoras, apresentam uma maior relevância/utilidade para o ensino da química orgânica.

Aplicações de jogos para o ensino da Química Orgânica

As aplicações de jogos desenvolvidas para o ensino da química orgânica abrangem vários tópicos, desde a nomenclatura até à síntese. Na Tabela 1 apresenta-se uma sistematização dessas aplicações, na qual, entre outras informações se indica o(s) ano(s) de escolaridade no qual cada aplicação pode ser utilizada, o idioma no qual se encontra, bem como a sua disponibilidade em termos do seu custo (valor monetário).

Tabela 1 – Sistematização de aplicações desenvolvidas para o ensino da química orgânica.

Aplicação	Temática abordada	Escolaridade	Idioma ^a	Disponibilidade ^b
<i>Chirality-2</i>	Grupos funcionais; Classificação da estrutura; Forças intermoleculares; Isómeros; Centros quirais; Nomenclatura	10.º ano/U	EN	F
<i>Mechanisms</i>	Mecanismos de substituição; Mecanismos de eliminação	12.º ano/U	EN	GL
<i>Chairs</i>	Conformações do ciclo-hexano	U	EN	P
<i>MILAGE Aprender+</i>	Diversa	7.º ano/U	PT/EN	GA
<i>Nomenclature Bets^c</i>	Nomenclatura	10.º ano/U	PT/EN	G
<i>Isomers</i>	Isómeros	10.º ano/U	PT/EN	P

^aPT – Português; EN – Inglês. ^bF – Grátis; GL – Grátis para funcionalidades limitadas; P – Pago; GA – Grátis com autorização do autor. ^cPágina na internet: ldse.ufc.br/nomenclaturebets.

O *Chirality-2* é uma aplicação de um jogo que cobre múltiplos aspetos da química orgânica introdutória podendo ser utilizado no ensino secundário e superior. Os tópicos abordados são a identificação de um grupo funcional, a classificação da estrutura, as forças intermoleculares, os isómeros, os centros quirais e a nomenclatura. A aplicação usa interfaces *touch-screen* de arrastar e soltar para que os utilizadores resolvam quebra-cabeças e respondam a perguntas. No caso da identificação do grupo funcional e das forças intermoleculares, os jogadores recebem uma imagem de uma molécula e usam uma interface de arrastar e soltar para mover blocos com o nome de grupos funcionais ou da força intermolecular para o local correto. Já no caso da classificação da estrutura, é apresentada ao jogador uma tabela exibindo nomes e estruturas, e este deve fazer corresponder a estrutura ao respetivo nome. Os pares contêm imagens/nomes de aminas primárias, secundárias ou terciárias, álcoois, halogenetos de alquilo e carbocatiões. Os pares corretos são removidos quando selecionados. Pares incorretos não são removidos. No isomerismo, o jogador recebe cinco pares de isómeros (de um grupo de 18) e deve identificar o seu tipo. Após o envio da resposta, o jogador recebe um *feedback* instantâneo sobre se a escolha foi ou não correta. No tópico dos centros quirais, o jogador é apresentado a uma molécula, na qual tem de identificar os centros quirais existentes. O jogo mostra quais dos átomos selecionados foram identificados corretamente ou incorretamente, bem como aqueles que deveriam ter sido identificados, mas não o foram. Ainda pergunta adicionalmente quantos estereoisómeros a molécula possui. No caso da nomenclatura de moléculas, são mostradas ao jogador 10 imagens de moléculas orgânicas, para as quais deve selecionar o nome correto entre quatro opções [12].

O *Chairs* foi desenhado com o objetivo de ensinar as conformações do ciclo-hexano. Os estudantes aprendem os conceitos por tentativa e erro enquanto jogam. Ao jogador são apresentados dois isómeros conformacionais diferentes do ciclo-hexano. Uma ligação é mostrada numa das conformações e um círculo pulsante marca a posição correspondente na outra conformação. O jogador deve desenhar a ligação nesta última conformação com o ângulo correto, axial ou equatorial. Se a ligação desenhada não estiver dentro de um intervalo estreito próximo do ângulo correto, será mostrada a vermelho. Quando a ligação que está a ser desenhada está na posição correta, a ligação fica verde, assim como o contorno da conformação [13].

O *Mechanisms* é uma aplicação que, contrariamente às anteriormente referidas, é paga. Nesta aplicação estão envolvidos apenas dois tipos de reações de substituição e eliminação. As moléculas apresentam-se em modelos de linha (ligações químicas) e bola

(átomos) e o jogador faz movimentar os átomos de modo a que ocorra a reação [13,14].

O *MILAGE Aprender+*¹ é uma aplicação onde o professor pode colocar os conteúdos que pretende, disponibilizando exercícios e soluções, bem como a respetiva cotação. Os alunos realizam os exercícios propostos submetendo uma fotografia da solução. Após isto, o aluno pode visualizar a solução que havia sido disponibilizada pelo professor na aplicação e pode realizar a sua autoavaliação ou avaliar a resolução submetida por um colega. A aplicação permite assim a autoavaliação e a avaliação pelos pares o que ajuda o aluno a consolidar a matéria [16].

O *Nomenclature Bets* é um jogo online em que os estudantes do ensino secundário ao superior jogam em pares. A nomenclatura de compostos orgânicos é o tópico abordado numa competição divertida e envolvente onde os jogadores podem responder até 650 perguntas de escolha múltipla [17].

O *Isomers* é uma aplicação paga na qual são apresentados ao jogador vários átomos de carbono, e consoante a opção previamente selecionada pelo jogador: (1) faz ligações entre os átomos de acordo

com o(s) requisito(s) apresentado(s) pelo jogo; (2) a partir do nome indicado faz a estrutura do composto ou; (3) reproduz a estrutura do composto [17,18].

Conclusões

O recurso a jogos no ensino pode ser visto como uma estratégia para aumentar o interesse dos alunos por matérias menos atrativas ou com um maior grau de dificuldade. Neste sentido, o ensino e a aprendizagem da química orgânica pode ser potenciado pelo uso das aplicações de jogos existentes, sendo a sua maioria de uso livre.

Notas

¹ A aplicação foi desenvolvida inicialmente para trabalhar conteúdos matemáticos mas, atualmente, é utilizada em diversas disciplinas, nomeadamente no ensino de línguas, análise e modelação de sistemas e na química, mais especificamente na química orgânica.

Referências

- [1] M. T. Crimmins, B. Midkiff, *J. Chem. Educ.* **94** (2017) 429-438.
- [2] A. J. Franco-Mariscal, J. M. Oliva-Martínez, Á. Blanco-López, E. España-Ramos, *J. Chem. Educ.* **93** (2016) 1173-1190.
- [3] J. V. Russell, *J. Chem. Educ.* **76** (1999) 487.
- [4] M. J. Welsh, *J. Chem. Educ.* **80** (2003) 426-427.
- [5] E. Erdik, *J. Chem. Educ.* **80** (2003) 429-430.
- [6] R. A. Kletsch, *J. Chem. Educ.* **55** (1978) 104.
- [7] S. C. Farmer, M. K. Schuman, *J. Chem. Educ.* **93** (2016) 695-698.
- [8] J. M. Carney, *J. Chem. Educ.* **92** (2015) 328-331.
- [9] J. V. Russell, *J. Chem. Educ.* **76** (1999) 481.
- [10] A. J. Williams, H. E. Pence, *J. Chem. Educ.* **88** (2011) 683-686.
- [11] V. D. B. Bonifácio, *J. Chem. Educ.* **89** (2012) 552-554.
- [12] O. A. H. Jones, M. Spichkova, M. J. S. Spencer, *J. Chem. Educ.* **95** (2018) 1216-1220.
- [13] J. Winter, M. Wentzel, S. Ahluwalia, *J. Chem. Educ.* **93** (2016) 1657-1659.
- [14] "Mechanisms, app." [Online]. Disponível em: https://play.google.com/store/apps/details?id=com.alchemiesolns.mechanisms&hl=en_US.
- [15] "Mechanisms, Webpage." [Online]. Disponível em: <https://www.alchem.ie/mechanisms>. [Acesso: 17/09/2019].
- [16] "Milage Aprender+." [Online]. Disponível em: https://milage.ualg.pt/?page_id=1176.
- [17] J. N. Da Silva Júnior et al., *J. Chem. Educ.* **95** (2018) 2055-2058.
- [18] "Isomers, App." [Online]. Disponível em: <https://play.google.com/store/apps/details?id=com.alchemie.isomers&hl=pt>.
- [19] "Isomers, webpage." [Online]. Disponível em: <https://www.alchem.ie/isomers>.

>

*Custódia Fonseca

É Professora Auxiliar do Departamento de Química e Farmácia da Universidade do Algarve. Os seus interesses científicos têm sido dentro da área de química orgânica e química farmacêutica, estudos mecanísticos de catálise heterogénea, isolamento de toxinas e estudo de compostos com atividade biológica. Enquanto docente, tem-se interessado pelo uso de novas tecnologias no seu ensino. cfonseca@ualg.pt ORCID.org/0000-0002-2480-3364.

>

Marielba Zacarias

É Professora Auxiliar no Departamento de Engenharia Informática e de Computadores da Universidade do Algarve, onde leciona disciplinas de Informática. Os seus interesses de investigação abrangem as áreas de arquiteturas e ontologias empresariais, desenho da interação homem-máquina, com foco especial no estudo da eficácia de tecnologias informáticas no ensino. mzacaria@ualg.pt ORCID.org/0000-0003-1640-2963.

O Princípio de uma Boa Lavagem. Será a Água Suficiente?

>
Marta C. Corvo



Material

- Óleo de cozinha (30 mL = 2 colheres de sopa)
- Café em pó
- 2 recipientes
- 4 folhas de papel absorvente
- 2 colheres de sopa
- Sabonete líquido
- Acesso a água corrente
- (bacia de lavatório ou lava-loiças)

NOTA: A atividade deverá ser feita próximo de um lavatório e junto a superfícies de fácil limpeza.

Introdução

As nossas rotinas diárias mudaram bastante nos últimos tempos. A atividade proposta nesta edição pretende ilustrar a eficácia da lavagem das mãos com sabonete líquido. A limpeza das mãos exclusivamente com água não é eficaz. A presente

atividade, literalmente *hands on*, demonstra a importância do uso de uma substância como o sabonete para uma boa higienização das mãos. A atividade deverá ser efetuada por um par de voluntários experimentalistas.

Procedimento

1. Colocar duas colheres de sopa de óleo num recipiente e duas colheres de café noutro recipiente.



2. Colocar uma colher de óleo na mão direita de cada voluntário, seguida de uma colher de café. Cada um deverá esfregar as mãos para garantir que espalha bem a mistura.



3.

Um dos voluntários do par será o **TESTE** e o outro será o **CONTROLO**.

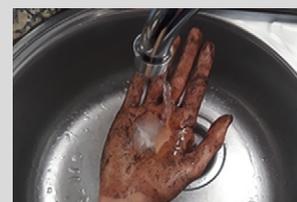
TESTE



CONTROLO

4.

Colocar uma pequena quantidade de sabonete líquido na mão do voluntário **TESTE**. Junto do lavatório, abrir uma torneira deixando correr só um fio de água. Cada voluntário deverá fazer passar as suas mãos por baixo da corrente de água. Observar as mãos após esta passagem.



5.

O **CONTROLO** deve passar as mãos por baixo de água de modo idêntico ao **TESTE**. Observar as mãos após esta passagem.



6.

Ambos os voluntários esfregam as suas mãos durante 5 segundos antes de voltar à torneira, e outros 5 segundos com as mãos por baixo da torneira. Fechar a torneira.

7.

Cada um dos voluntários coloca uma mão numa folha de papel pressionando sem esfregar.

8.

Cada um dos voluntários limpa as mãos na respetiva segunda folha de papel.



9.

Ambos os voluntários lavam as mãos com o sabonete líquido de modo a retirar todos os vestígios de óleo e café.

Explicação

Na atividade proposta, o óleo e o café simularam a sujidade que podemos ter nas mãos. A sujidade é constituída por diversos resíduos, mas na maioria das vezes contém gorduras e óleos, podendo também conter bactérias e vírus. O óleo não se mistura com a água, por isso a lavagem somente com água é ineficaz. No entanto, quando juntamos sabonete líquido estamos a adicionar uma substância que ajuda a água e o óleo a se misturarem – é chamada de surfactante. É necessário que esta mistura aconteça para que a sujidade seja levada pela água. Quando o **TESTE** colocou o sabonete na mão suja e deixou passar alguma água, um pouco da mistura óleo+café foi arrastada pela

água mesmo antes de esfregar as mãos, ao contrário do **CONTROLO**. Depois de esfregar as mãos e voltar a passar por água, o **TESTE** removeu a maior parte da sujidade, como se pode ver na folha 1. Na folha 1 do **CONTROLO**, observamos que existem mais resíduos de café, além de se observarem também resíduos de óleo. Esta observação repete-se em maior escala nas folhas 2. Por fim, é possível constatar que 10 segundos de lavagem das mãos podem não ser suficientes. Neste caso, a sujidade era bastante visível, no entanto pode acontecer que a sujidade não seja visível a olho nu. O ideal é lavar as mãos com um surfactante, durante um período mais longo para assegurar uma boa higiene.

Referências

- [1] *Adaptado Oil and Water: Washing Up with Surfactants - Activity - TeachEngineering* em teachengineering.org/activities/view/usf_surfactants_act4 (consultado em 08/06/2020).

>

Marta C. Corvo

É investigadora no i3N|CENIMAT, Departamento de 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.

ANALÍTICA 2020



Mais informações acerca deste evento disponíveis em:
analitica2020.events.chemistry.pt

O ANALÍTICA 2020, 10.º Encontro da Divisão de Química Analítica da SPQ, que teria lugar em Lisboa, de 26 a 28 de outubro de 2020, foi transformado num evento virtual.

O programa constará de lições plenárias, palestras convidadas e comunicações orais, além de comunicações em painel, sobre todos os temas da Química Analítica moderna, tanto na perspetiva de métodos e procedimentos de medição, como no que toca à tipologia dos sistemas materiais em estudo, visando entre outras, as áreas Ambiental, Forense, Alimentar, Farmacêutica, Industrial e Fundamental.

Conscientes do momento de grandes desafios e incertezas que globalmente atravessamos, empenhamo-nos em promover um evento de elevada qualidade, oportunidade de partilha e aprendizagem, para o qual convidamos a comunidade analítica a participar, contribuindo com a sua presença e com apresentações científicas e técnicas dentro das respetivas competências.

O 7.º Encontro Português de Químicos Jovens (7th Portuguese Young Chemists Meeting, PYCheM), inicialmente previsto para os dias 20 a 22 de maio em Bragança, foi adiado para a mesma cidade, entre os dias 19 e 21 de maio de 2021.

Esta série de conferências destinadas, preferencialmente, aos jovens químicos teve início em outubro de 2008, no Instituto Superior Técnico da Universidade de Lisboa, e tem sido realizada bianualmente, cruzando várias das instituições mais prestigiadas de Portugal. Os jovens químicos e investigadores de qualquer nacionalidade são particularmente incentivados a partilhar os seus resultados científicos, a alargar os seus contactos internacionais e a assistir a palestras de especialistas reconhecidos em várias áreas da química. O crescimento gradual, quer em número de participantes, quer na qualidade dos oradores, reforça o PYCheM como uma das principais conferências organizadas pela SPQ.

7th Portuguese Young Chemists Meeting



Mais informações acerca deste evento disponíveis em:
7pychem.events.chemistry.pt

Agenda

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

> outubro de 2020

26 - 28 de outubro de 2020, Lisboa, Portugal (virtual)
10.º Encontro da Divisão de Química Analítica da SPQ
analitica2020.events.chemistry.pt

26 - 28 de outubro de 2020, Puerto Vallarta, México
XXVII Congreso Iberoamericano de Catálisis
acat.org.mx/CICAT

26 - 28 de outubro de 2020, Caparica, Portugal
2nd International Caparica Conference on
Leishmaniasis 2020
leishmaniasis2020.com

novembro de 2020

09 - 12 de novembro de 2020, Caparica, Portugal
4th International Caparica Conference on
Chromogenic and Emissive Materials 2020
ic3em2020.com

30 de novembro - 03 de dezembro de
2020, Caparica, Portugal
4th International Caparica Christmas Conference
on Sample Treatment 2020
sampletreatment2020.com

janeiro de 2021

19 - 22 de janeiro de 2021, Vigo, Espanha
XXIX Simpósio do Grupo Especializado de
Cristalografia e Crescimento de Cristais das Reais
Sociedades Espanholas de Física e Química
ge3c.gal

março de 2021

29 - 31 de março de 2021, Coimbra, Portugal
14.º Encontro de Química Física
xivenqf.events.chemistry.pt

abril de 2021

datas a confirmar (2 dias entre 26 - 30), Aveiro, Portugal
13th Inorganic & Bioinorganic Chemistry Conference
13ibcc.events.chemistry.pt

julho de 2021

04 - 07 de julho de 2021, Brighton, Reino Unido
8th Conference of the Federation of European Zeolite
Associations (FEZA 2020)
fezaconference.org

06 - 09 de julho de 2021, Málaga, Espanha
XXVII National Spectroscopy Meeting / XI Iberian
Spectroscopy Meeting
rne2021.com

11 - 14 de julho de 2021, Braga, Portugal
XXVII Encontro Nacional da SPQ

21 - 23 de julho de 2021, Roma, Itália
6th International Congress on Water,
Waste and Energy Management
waterwaste-20.com

21 - 23 de julho de 2021, Roma, Itália
5th International Conference on Green Chemistry
and Sustainable Engineering
greenchem-20.com

26 - 28 de julho de 2021, Roma, Itália
2020 International Conference on
Materials and Nanomaterials
mns-20.com

28 - 30 de julho de 2021, Roma, Itália
2020 International Conference on Green Energy
and Environmental Technology
geet-2020.com

agosto de 2021

29 de agosto - 3 de setembro de 2021, Praga,
República Checa
15th European Congress on Catalysis (EuropaCat)
www.europacat2021.cz

31 de agosto - 3 de setembro 2021, Évora, Portugal
International Symposium on Synthesis
and Catalysis 2021 (ISySyCat2021)
isysycat2021.events.chemistry.pt

setembro de 2021

01 - 04 de setembro de 2021, Aveiro, Portugal
12th Ibero-American Congress on Sensors
ibersensor2020.events.chemistry.pt

AGENDA SPQ

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

05 - 10 de setembro de 2021, Lisboa, Portugal
XXII International Symposium
on Homogeneous Catalysis
xxii-ishc.events.chemistry.pt

novembro de 2021

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

dezembro de 2021

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

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

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

janeiro de 2022

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

junho de 2022

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

julho de 2022

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

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

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

agosto de 2022

28 de agosto - 1 de setembro de 2022,
Lisboa, Portugal
8th EuChemS Chemistry Congress
euchems2022.eu

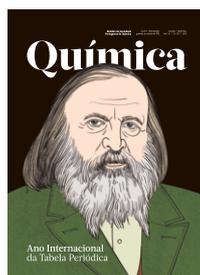
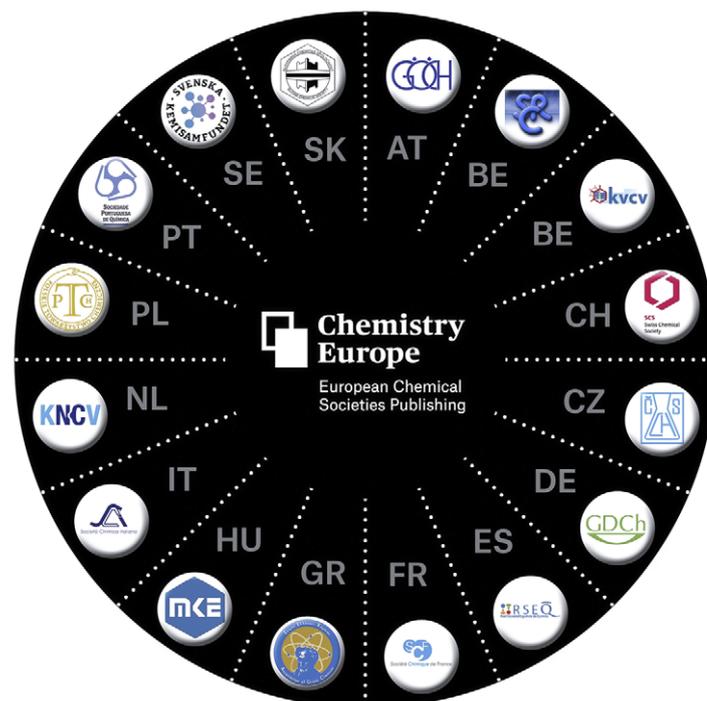
setembro de 2022

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

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

Eventos adiados (sem data definida)

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



Ano Internacional da Tabela Periódica 2019

No Vol. 43 | N.º 155 | 2019, na secção dedicada ao Ano Internacional da Tabela Periódica 2019, por lapso, alguns eventos não foram incluídos e foram encontradas outras pequenas imprecisões. A Direção do QUÍMICA pretende corrigir rapidamente as falhas detetadas já no próximo número e a versão digital, que se encontra atualmente na página da SPQ, será substituída em conformidade. Neste sentido, solicita-se o contributo de todos quantos possam colaborar nesta tarefa, fazendo chegar ao Diretor do QUÍMICA (bspq@uevora.pt) os reparos e a informação pertinente, para que se possam efetuar todas as correções necessárias.

Boletim da Sociedade
Portuguesa de Química

Química

www.spq.pt

janeiro - março
Vol. 44 | N.º 156 | 2020



SOCIEDADE
PORTUGUESA
DE QUÍMICA