

11th International Conference on the History of Chemistry, Trondheim – Noruega



Decorreu em Trondheim, Noruega, entre 29 de agosto e 2 de setembro, a 11th International Conference on the History of Chemistry – <http://www.ntnu.edu/11ichc>, que reuniu cerca de uma centena de participantes.

Simultaneamente foi oportunidade para comemorar o 41.º aniversário da criação do Working Party (WP) on History of Chemistry da European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS). O objetivo geral das conferências organizadas pelo WP é facilitar a comunicação entre químicos / educadores químicos interessados na história e historiadores da química e reunir a comunidade periodicamente.

As conferências plenárias deste encontro foram proferidas por Hasok Chang, da Universidade de Cambridge, sobre o tema “What history tells us about the nature of chemistry”. Maria Rentetzi, da National Technical University de Atenas, trouxe à atenção dos participantes as radiações e, em particular, como ocorre “Living with Radiation: What Historians of Chemistry Have to do With Science Diplomacy and International Organizations”. A terceira e última plenária coube a Anders Lundgren, da Universidade de Uppsala, e recaiu sobre “Science in chemical industry: what did it do?”

O programa da conferência agrupou painéis específicos, que incidiram sobre:

- *Chemists and the IUPAC: Taking Responsibility and Taking Actions*
- *The chemical innovation system in the "Third Reich"*
- *Toxic Products in the Public Sphere: Narratives, Spaces and Controversies*
- *Toxic Products / Toxic Risks*
- *Relating Chemistry: Translating Chemistry Across Linguistic, Disciplinary, and Physical Boundaries*
- *What future for the history of recent chemistry and molecular sciences? New Challenges in the History of Chemistry and the Molecular Sciences*

tendo, além disso, havido várias apresentações nas seguintes sessões temáticas:

- *Alchemy and Early Chemistry*
- *Women in Chemistry*
- *Elements and the Structure of Matter*
- *Dyes and Pigments in History*
- *Recent Chemistry: New methodological approaches*
- *Science teaching: Historical perspectives*
- *Chemistry teaching: new approaches*
- *Boundary work: Chemistry and Economy*
- *Biographical approaches*

e ainda, com o patrocínio da INEOS/NOVYN, a sessão *Polymers and Plastics* e a apresentação do filme *Bakelite*.

Durante a conferência, decorreu a habitual reunião de trabalho com os membros representantes das diferentes sociedades no Working Party. Estiveram presentes 17 representantes e ainda observadores da Chemical Heritage Foundation, Japão e ICOTECH, tendo-se acordado, entre outros assuntos, o local da realização da próxima conferência de história da química. A realização da mesma caberá à Universidade de Maastricht (Holanda) e deverá ocorrer no início de agosto de 2019, em data a confirmar e a atender à proximidade de realização da ABCchem - Atlantic Basin Conference on Chemistry desse ano.

Do programa social, destacam-se a excursão a Sverresborg, um concerto na catedral Nidaros (Trondheim) e o passeio a pé a Ladestien. No último dia, houve uma excursão extra à antiga vila mineira de Røros, onde desde o século XVII e até 1977 se fazia a exploração de cobre. Em 1980, foi declarada, pela UNESCO, como património da humanidade.

Aveiro, 30 de setembro de 2017

Isabel Malaquias

Congresso EUROANALYSIS 2017 (19th edition)



O congresso EUROANALYSIS 2017 (19th edition) decorreu entre 28 de agosto e 1 de setembro de 2017 em Estocolmo, Suécia. Este congresso, organizado sob a égide da Divisão de Química Analítica da EuCheMS – European Association for Chemical and Molecular Sciences, é considerado o grande congresso europeu da Química Analítica, tendo por isso abrangido uma grande variedade de temas, focando novos desenvolvimentos na área assim como aplicações inovadoras. Destacam-se a conferência plenária proferida pelo recipiente do DAC-EuCheMS Award – Prof. Lo Gorton, com o título “Analytical tools based on electrochemical communication between enzymes/cells and electrodes” e a distinção Robert Kellner Lecture, atribuída ao Prof. Luigi Mondello, que proferiu uma lição sobre “Different approaches to multidimensionality in chromatographic separations coupled to mass spectrometry detection to face challenging analytical tasks”. O programa englobou ainda mais oito lições plenárias, 34 lições convidadas (keynotes), cerca de 115 comunicações orais e cerca de 270 painéis. A participação correspondeu à abrangência dos temas, tendo sido registados cerca de 500 participantes de 53 nacionalidades diferentes. A comunidade portuguesa também esteve presente, com nove participantes registados. O próximo congresso EUROANALYSIS terá lugar em Istambul, entre 1 e 5 de setembro de 2019 (<http://www.euroanalysis2019.com/>).

Marcela Segundo
Universidade do Porto

MACC_17: Methods and Applications in Computational Chemistry

O encontro “MACC_17: *Methods and Applications in Computational Chemistry*” realizou-se no Departamento de Química da Universidade de Coimbra (DQ-UC) no passado dia 6 de setembro. Estiveram presentes mais de 50 investigadores desta área do conhecimento, entre os quais 13 oradores convidados de várias instituições de investigação portuguesas e estrangeiras (<http://macc17.qui.uc.pt>). Este encontro, organizado sob a égide do Grupo de Química Computacional da SPQ (http://www.spq.pt/grupo/quimica_computacional) e com o apoio do DQ-UC e do Centro de Química de Coimbra, contribuiu para dar a conhecer a investigação desenvolvida pela comunidade dos químicos computacionais em Portugal. Prevê-se que outros encontros deste tipo possam ser organizados futuramente, estando o II Simpósio de Química Computacional já agendado para 2018, durante o 13.º Encontro de Química Física da SPQ, na Universidade do Algarve.

A Comissão Organizadora

International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2017)

A segunda edição do *International Symposium on Synthesis and Catalysis (ISySyCat2017)* decorreu na Universidade de Évora, no Colégio do Espírito Santo, entre 5 e 8 de setembro do ano corrente. Este encontro teve cerca de 250 participantes provenientes de 37 países (de quatro continentes), estando muito perto de duplicar o número de participantes da edição de 2015. O foco do simpósio foi a síntese química e a catálise, bem como as possíveis sinergias nestas áreas entre a investigação académica e a indústria.



Cerimónia de abertura do ISySyCat2017, que contou com a presença de Anthony Burke (Organizador), Paulo Quaresma (Reitoria da Universidade de Évora), Ana Cardoso de Matos (Instituto de Investigação e Formação Avançada), Carlos Pinto Gomes (Escola de Ciências e Tecnologia da Universidade de Évora), Peter Carrott (Centro de Química de Évora) e Adelino Galvão (SPQ).

O programa científico contou com 15 lições plenárias e 68 comunicações convidadas e *flash-talks*. Os oradores presentes, muitos deles de renome internacional, abordaram temas como: síntese total de produtos naturais; síntese

na química medicinal e na química biológica e desenvolvimento de processos para síntese de fármacos; novos reagentes e catalisadores; síntese de compostos de coordenação; estratégias e conceitos para a síntese orgânica; biocatálise; organocatálise; aplicação de *flow-chemistry* na síntese de moléculas-alvo; aplicação de compostos organometálicos na síntese e catálise; síntese estereosseletiva; síntese e propriedades de moléculas funcionais e materiais orgânicos; síntese e métodos catalíticos sustentáveis; ferramentas computacionais para síntese e catálise.

Dos resumos submetidos para o congresso foram selecionadas 25 comunicações orais, 43 comunicações *flash* e 172 comunicações em painel. Foram atribuídos quatro prémios para comunicações *flash* e seis prémios para comunicações em painel. A promoção do diálogo entre a investigação académica e a indústria foi uma preocupação constante durante o congresso, com a perspetiva dos benefícios de que daí podem advir, nomeadamente mais inovação e maior competitividade, proveitos para as empresas e geração de emprego, com os consequentes benefícios gerais para a sociedade.

No que se refere ao programa social, houve espaço para o convívio e discussão entre os participantes nos *coffee-breaks*, *cocktails* e banquete. Houve ainda lugar para visitar a histórica cidade de Évora e a vila de Monsaraz.

É de realçar que a segunda edição do congresso ISySyCat superou os seus objetivos e foi um sucesso. O *feedback* recebido dos congressistas durante e após o congresso foi extremamente positivo e motivador para se proceder à organização da terceira edição do ISySyCat em setembro de 2019.

A Comissão Organizadora agradece a todas as pessoas e entidades que colaboraram, tornaram possível e contribuíram para o sucesso deste congresso, nomeadamente os patrocinadores e instituições que apoiaram o evento, e em particular à Universidade de Évora e à SPQ. Por último, um agradecimento a todos os participantes do ISySyCat2017.

Mais informações em <http://isysycat2017.eventos.chemistry.pt>.

A Comissão Organizadora

Reunião anual da Divisão de Química Verde e Sustentável da EuCheMS

No dia 4 de setembro realizou-se a reunião anual da Divisão de Química Verde e Sustentável (*Division of Green and Sustainable Chemistry – DGSC*) da Associação Europeia para as Ciências Químicas e Moleculares (EuCheMS), onde a SPQ esteve representada pelos professores Ana Aguiar Ricardo (Universidade NOVA de Lisboa) e José Nuno Canôngia Lopes (Universidade de Lisboa). O presidente da Divisão, Nicholas Gathergood, informou sobre a nomeação de Piotr Stepnowski para o cargo de vice-presidente da Divisão e congratulou-se com a entrada do novo delegado da Sociedade de Química Austríaca na Divisão.

Como vinha sendo planeado desde a última reunião anual da DGSC, houve várias iniciativas por forma a fomentar ações conjuntas interdivisionais. Em particular, os presidentes da DGSC e da Divisão de Química Orgânica (DOC) acordaram que um participante designado pela

DGSC participasse na oficina dos Jovens Investigadores da DOC. Outra ação conjunta da DGSC e a da Divisão de Química e Meio Ambiente (*Division of Chemistry and the Environment – DCE*) é a atribuição do prémio europeu de Química Sustentável (*EuCheMS European Sustainable Chemistry Award – ESCA*). Já foram notificadas várias candidaturas e o painel de avaliação divulgará a sua decisão em novembro próximo. O vencedor da ESCA será plenarista no Congresso da EuCheMS que ocorrerá em Liverpool em 2018.

Para promover vínculos mais estreitos com o subcomité de Química Verde da IUPAC, Pietro Tundo (presidente do subcomité) e Nicholas Gathergood decidiram nomear um observador de cada comité para que estes participem nas reuniões anuais dos comités das outras organizações. Assim, Janet Scott foi nomeada pela IUPAC como observadora (sem direito a voto) no comité da DGSC e Nicholas Gathergood foi indicado como observador da DGSC para a próxima reunião da IUPAC, que se realizará em Moscovo em outubro de 2017.

Ana Aguiar Ricardo

Representante da SPQ na Divisão de Química Verde e Sustentável da EuCheMS

Congresso bianual de Química Verde e Sustentabilidade (3EUGSC)

De 4 a 6 de setembro, decorreu a terceira edição do congresso bianual de Química Verde e Sustentabilidade, organizado pela Divisão com o mesmo nome da EuCheMS. O encontro presidido por Michael North, realizou-se em York, no Reino Unido, com a participação de 120 delegados, dos quais 15 foram portugueses, contribuindo com várias comunicações orais convidadas e uma *keynote* dada por Ana Nunes, do REQUIMTE-LAQV (Laboratório Associado para a Química Verde), sobre as estratégias de intensificação de processos para reutilização de CO₂. Destacou-se a forte participação portuguesa, a qual deverá estar ligada ao sucesso que a 2.^a edição (2EUGSC) teve aquando da sua realização em Lisboa, em outubro de 2015, onde contou com 212 delegados.

O 3EUGSC iniciou-se com a conferência plenária de James Clark sobre a importância da Química Verde para a economia circular, prosseguindo com uma série de lições plenárias e *keynotes* onde foi realçada e discutida a necessidade da implementação de processos limpos e uso de materiais renováveis na indústria. De salientar as contribuições de Babbette Peterson que trouxe a análise destes temas do ponto de vista da indústria, a de Paul Anastas e



Fotografia dos delegados da 3EUGSC

a de Nicholas Gathergood, esta última sobre o desenvolvimento de catalisadores com reduzida toxicidade e maior biodegradabilidade. A última plenária do encontro foi dada por Ben Feringa, laureado com o Prémio Nobel da Química em 2016, que falou sobre novas metodologias catalíticas que revolucionarão a atual indústria tornando-a mais sustentável.

Ana Aguiar Ricardo

Representante da SPQ na Divisão de Química Verde e Sustentável da EuCheMS

XXII Olimpíada Ibero-Americana de Química 2017

Decorreu, de 8 a 15 de outubro de 2017 na cidade de Lima (Perú), a XXII OIAQ 2017, organizada pela *Pontificia Universidad Católica del Perú* (PUCP), através da sua secção de Química.

Estas olimpíadas realizaram-se pela segunda vez naquele país (a primeira foi em 2005) e este ano fizeram parte dos eventos comemorativos dos 100 anos da PUCP e dos 50 anos da sua secção de Química.

Este ano a representação portuguesa foi constituída pelo estudante José Diogo Costa Jesus, da Escola Secundária da Mealhada, e pelos mentores Clara Magalhães, do Departamento de Química da Universidade de Aveiro, e Carlos Rocha Gomes, do Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.

O José Diogo Costa Jesus honrou a participação Portuguesa com uma **medalha de bronze**. Como acontece em qualquer competição, também nas olimpíadas de Química o acesso às medalhas depende das pontuações obtidas por todos os participantes. Este ano a pontuação da maior parte dos estudantes foi muito semelhante pelo que a obtenção das medalhas foi decidida por centésimas. Esse facto reforça o mérito do participante português.

As Olimpíadas Ibero-americanas de Química, este ano na sua 22.^a edição, reúnem estudantes do ensino secundário de 18 países: Argentina, Bolívia, Brasil, Chile, Colômbia, Costa Rica, Cuba, El Salvador, Equador, Espanha, Guatemala, México, Panamá, Paraguai, Perú, Portugal, Uruguai e Venezuela. A Guatemala tem estado ausente nos últimos anos, mas espera-se que volte a participar no futuro. A participação portuguesa nestas Olimpíadas iniciou-se em 1999. Nesse ano, a SPQ recebeu um convite do país organizador, a Espanha, para enviar um representante a Santiago de Compostela que, de acordo com o Regulamento da OIAQ, seria apenas observador. Em 2000 Portugal participou com um grupo de quatro estudantes e em 2001 não se realizou a Olimpíada Ibero-Americana de Química. Desde 2002, todos os anos, os estudantes portugueses têm obtido Medalhas (de Ouro, Prata e Bronze) e Menções Honrosas.

Nas olimpíadas deste ano estiveram presentes delegações de 17 países, num total de 56 estudantes e 37 mentores e observadores. O Equador participou pela primeira vez com um grupo de estudantes, visto que em 2016 tinha participado como observador. Este ano reforçou-se a figura do estudante-guia, o que contribuiu para a troca de experiências entre os estudantes participantes na olimpíada e estudantes do país organizador.



Entrega do diploma e medalha de bronze ao estudante José Diogo Jesus, da Escola Secundária da Mealhada. O prémio foi entregue por María del Rosario Sun Kou, diretora do Departamento Académico de Ciências da Pontifícia Universidade Católica do Perú.

As Olimpíadas de Química constam de duas provas: uma prática, com dois trabalhos, para a qual os estudantes tiveram cinco horas para a sua realização, e uma prova teórica, para a qual os estudantes tiveram também cinco horas para a realizar. A classificação final de cada estudante é discutida com a equipa organizadora da olimpíada, numa sessão individual de avaliação. Esta tarefa é particularmente delicada pois é necessário chegar a um entendimento sobre as classificações propostas por ambas as partes: mentores e organização.

A Olimpíada Ibero-Americana atinge o seu ponto alto na sessão de encerramento onde são atribuídas as medalhas e menções aos estudantes premiados e apresentados os organizadores da próxima olimpíada. Assim, informa-se que a XXIII Olimpíada Ibero-Americana de Química terá lugar em São Salvador, capital de El Salvador, na segunda metade de setembro de 2018.

Carlos Rocha Gomes (Universidade do Porto) e
Clara Magalhães (Universidade de Aveiro)

Prémio Nobel da Química 2017

Jacques Dubochet (nascido em 1942 em Aigle, Suíça), professor na Universidade de Lausanne (Suíça), Joachim Frank (nascido em 1940 em Siegen, Alemanha), professor na Universidade Columbia (EUA) e Richard Henderson (nascido em 1945 em Edimburgo, Escócia), professor do Laboratório de Biologia Molecular MRC (Cambridge, Inglaterra), foram galardoados com o prémio Nobel da Química 2017 pelo "*desenvolvimento da microscopia crioeletrónica para a determinação da estrutura de alta resolução de biomoléculas em solução*".

Ao conhecer a estrutura e/ou a conformação 3D de uma molécula, o cientista adquire informação crucial que pode indicar como a molécula se comporta em processos químicos ou bioquímicos. Em biomoléculas, como proteínas, essa informação pode permitir entender as suas funções em sistemas biológicos, nomeadamente em células, abrindo por-

tas para que sejam sintetizadas novas moléculas (fármacos) para combater patologias relacionadas com essas proteínas.

O método de cristalografia de raios-X, usado desde os anos 50, tem sido o método mais comum para obter a estrutura de proteínas e de outras biomoléculas, mas só analisa biomoléculas cristalizadas, i.e. para muitas proteínas numa forma não natural. Um outro método, a espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) começou a ser usada nos anos 80, mas só pode ser aplicada na determinação de estruturas de biomoléculas pequenas (< 25 kDa). Portanto, como muitas biomoléculas importantes são grandes, ou formam complexos de grandes dimensões, ou não cristalizam, foi preciso encontrar um outro método aplicável a biomoléculas grandes no seu estado natural. Surgiu então a microscopia crioeletrónica.

Os três cientistas premiados trouxeram descobertas de diferentes áreas que foram necessárias para que a microscopia crioeletrónica pudesse ser aplicável a biomoléculas sem destruir a sua estrutura nativa. Richard Henderson começou a trabalhar com microscopia eletrónica nos anos 70 e conseguiu, em 1990, obter um modelo com resolução atómica para a proteína bacteriorrodopsina usando feixes de eletrões de baixa intensidade (para não queimar a amostra) e imagens registadas de vários ângulos [1]. Tal foi possível devido às propriedades particulares da proteína, em particular o seu empacotamento regular na membrana, e ao congelamento num vácuo que não destruiu a estrutura nativa. Para tornar o método aplicável a proteínas em geral foi necessário usar os métodos de análise de imagem desenvolvidos por Joachim Frank. O método matemático de Frank resolveu o problema de identificar padrões repetitivos em imagens de fraca intensidade que subsequentemente permitiu a construção de uma imagem 3D usando várias imagens 2D [2].

No entanto, as condições de congelação da amostra em vácuo, necessárias na microscopia crioeletrónica, resultavam em alterações na estrutura de muitas proteínas devido à formação de cristais de gelo. A peça final deveu-se ao trabalho de Jacques Dubochet, que propôs a aplicação da amostra aquosa numa rede metálica e a sua congelação rápida em etano, a -190 °C, de forma a resultar na formação de água vitrificada que não destrói a forma natural da biomolécula em estudo [3]. Assim, hoje em dia, usando microscopia crioeletrónica é possível visualizar, por exemplo, proteínas que conferem resistência a quimioterapia e a antibióticos; o complexo do vírus Zika; e os fibrilos que se formam na doença de Alzheimer, todos estes sistemas no seu estado natural, abrindo assim caminho para a obtenção de novos fármacos e de novas descobertas nos processos celulares vitais.

- [1] R. Henderson, J.M. Baldwin, T.A. Ceska, F. Zemlin, E. Beckmann, K.H. Downing, *J. Mol. Biol.* **213** (1990) 899–929.
- [2] M. Radermacher, T. Wagenknecht, A. Verschoor, J. Frank, *J. Microsc.* **146** (1987) 113–136.
- [3] M. Adrian, J. Dubochet, J. Lepault, A.W. McDowell, *Nature* **308** (1984) 32–36.

Brian Goodfellow
(Universidade de Aveiro)