XII semana da QUÍMICA
V Workshop da Pós-graduação em Química
Química 4.0: Os desafios para o mundo moderno

DIALOGANDO COM O PET SOBRE AS TECNOLOGIAS MODERNAS NA QUÍMICA

Sejam bem-vindos a nossa sala temática!

Quando você pensa em Tecnologia & Química, o que vem imediatamente a sua mente?

Adivinhas

Vamos ver se você conhece alguns termos que abordaremos hoje!

1- Apontado como o "combustível do futuro"

2- O Ceará caminha para se tornar referência nacional em sua produção.

?????

1- Apontado como o "combustível do futuro"

2- O Ceará caminha para se tornar referencia nacional em sua produção.

Hidrogênio Verde

1- Matriz com várias propriedades adsorventes.

2- Tem a capacidade de captar e armazenar H_2O e CO_2 atmosférico

?????

1- Matriz com várias propriedades adsorventes.

2- Tem a capacidade de captar e armazenar H_2O e CO_2 atmosférico

Metal Organic-Framework (MOF)

1- É responsável por promover/controlar rotas metabólicas

2- Usa as interações intermoleculares para mudar a conformação do substrato

?????

1- É responsável por promover/controlar rotas metabólicas

2- Usa as interações intermoleculares para mudar a conformação do substrato

Enzimas

1- Utilizados para identificação de disparos de arma de fogo

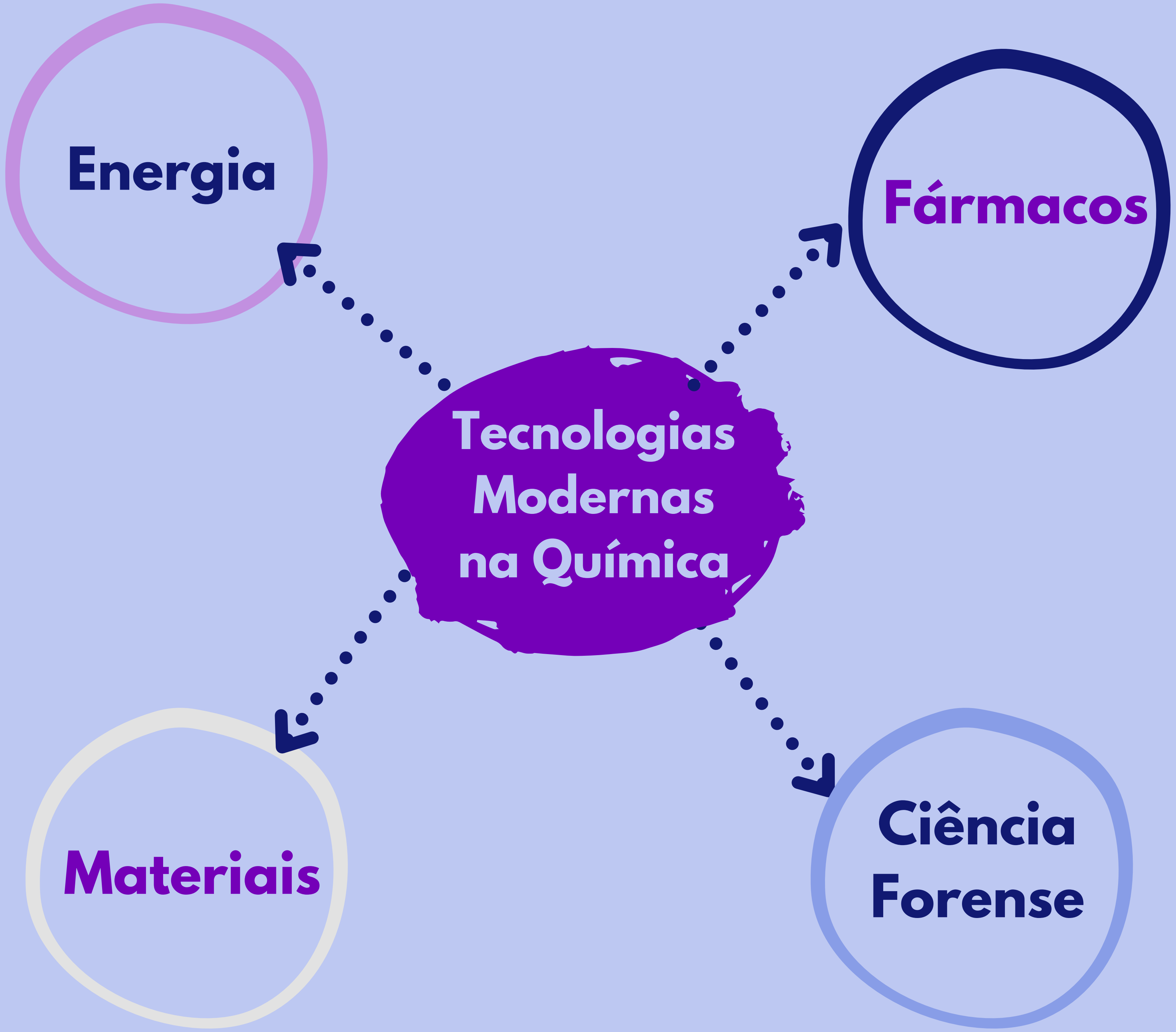
2- É introduzida na pólvora

?????

1- Utilizados para identificação de disparos de arma de fogo

2- É introduzida na pólvora

Marcadores Luminescentes


Tecnologias Modernas na Química
Energia
Fármacos
Materiais
Ciência Forense

PRÊMIO

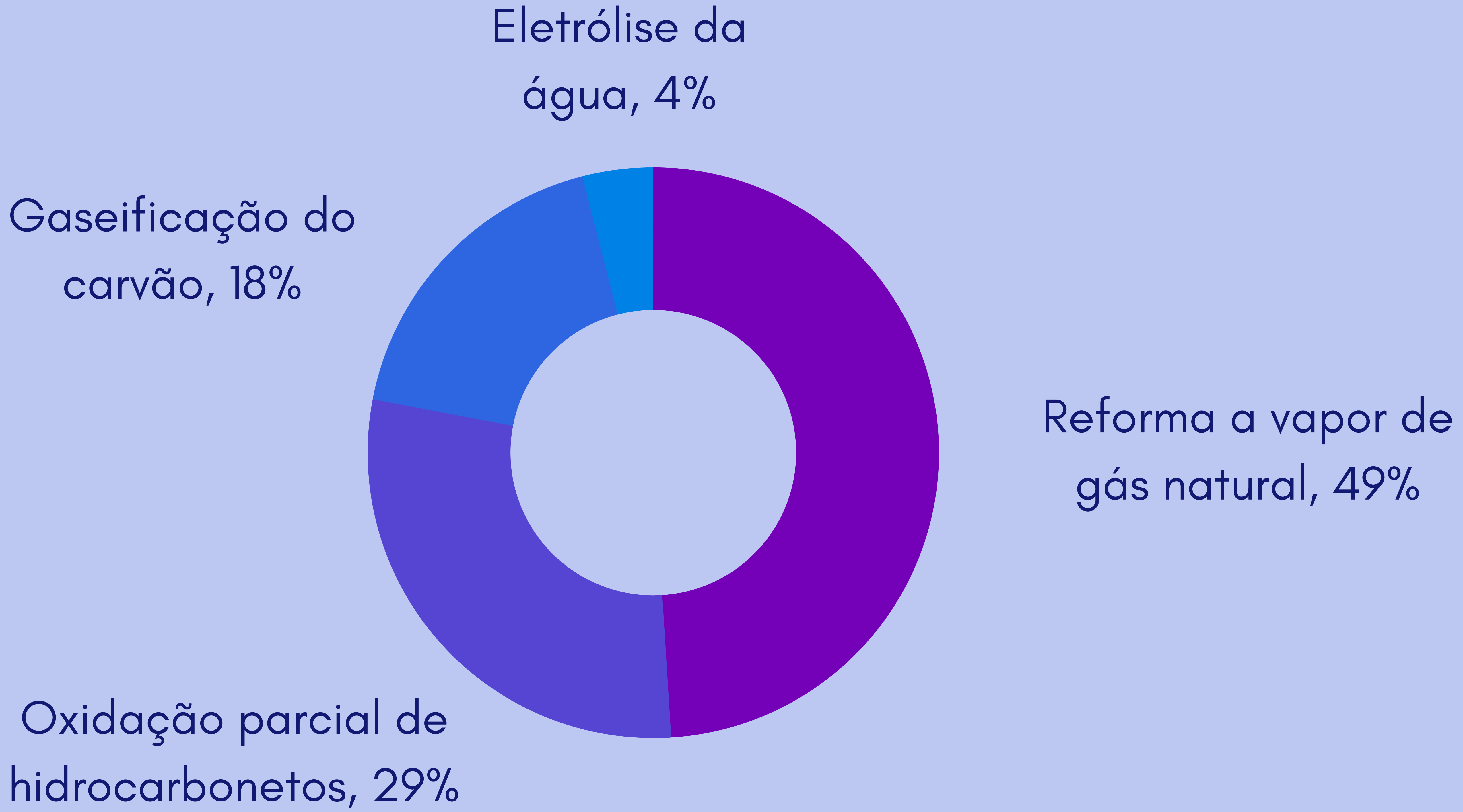
ENERGIA

O combustível do futuro

- O **hidrogênio** é considerado por muitos o combustível do futuro, e o motivo é simples, sua **combustão leva a formação de apenas, água.**
- São necessárias **soluções tecnológicas** para sua produção, transporte, armazenamento e manuseio.

Todo combustível a base de hidrogênio pode ser considerado uma energia verde?

Produção de hidrogênio



Hidrogênio Verde

- Hidrogênio produzido de modo **ambientalmente limpo**, a partir da **eletrólise da água,** com fontes de energia renováveis (SOUZA FILHO, 2021).

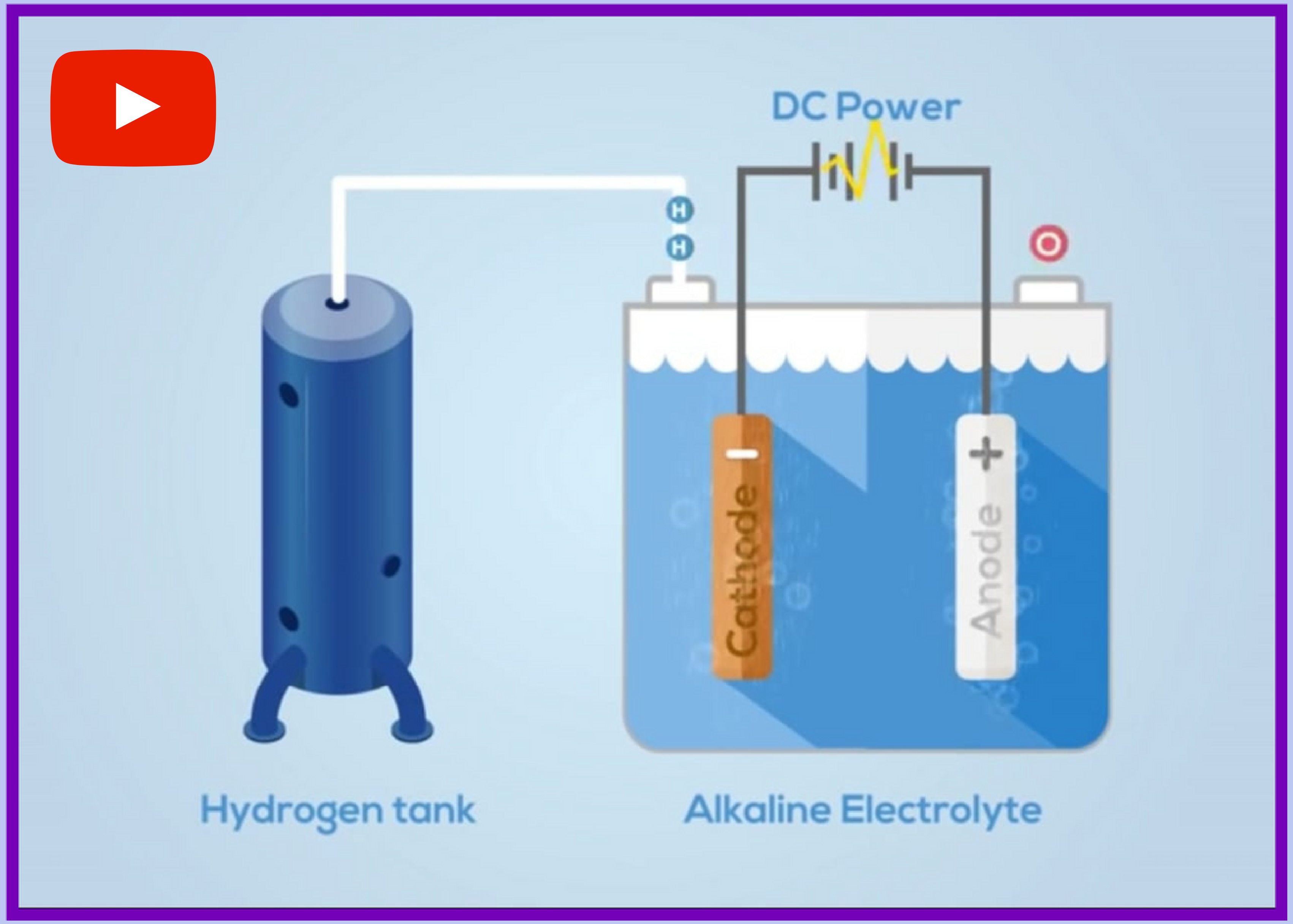
Eletrólise da água

Reação Global: $2H_2O \rightarrow 2H_2 + O_2$

Técnicas para eletrólise

- Solução Alcalina
- Membrana polimérica eletrolítica (PEM)

Eletrólise da água



Link: https://youtu.be/WfkNf7kMZPA

Hidrogênio Verde no Ceará

Por que o Ceará?

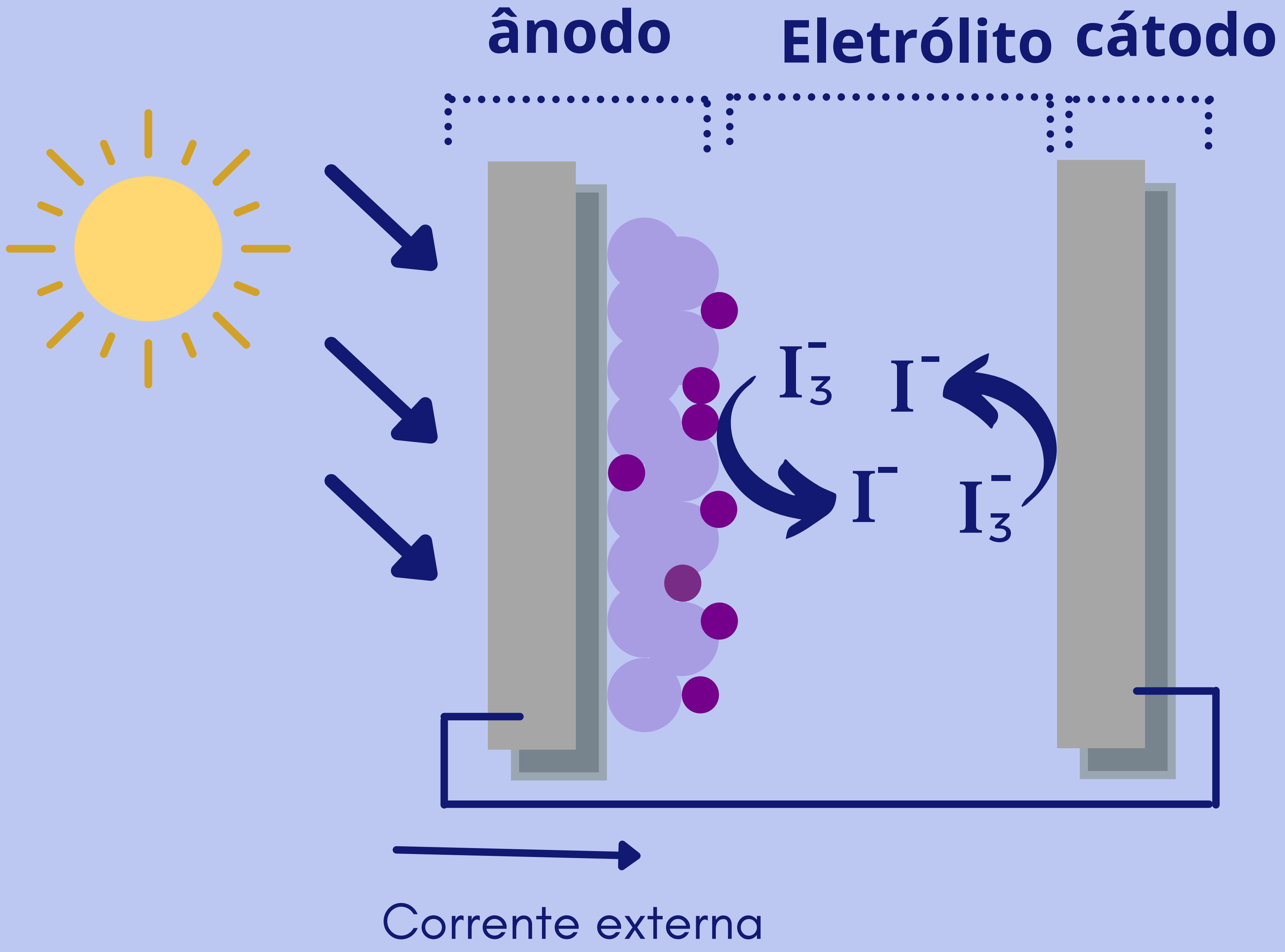
Elevada produção eólica e fotovoltaica; Localização estratégica e infraestrutura do Porto do Pecém; Centros de pesquisas mundialmente reconhecidos na área (UFC).

Como fornecer a energia elétrica necessária?

Fonte: portalsolar

- Energia limpa e renovável.
- Células fotovoltaicas de silício.
- Baixa produção mundial de energia solar fotovoltaica.
- Alto custo de fabricação.

DSSC - Células solares sensibilizadas por corante



Material Semicondutor (TiO_2)

Corantes de complexos de Rutênio

Regeneração do corante: $$C^+ + \frac{3}{2}I^- \rightarrow C + \frac{1}{2}I_3^- \quad (1)$$

Regeneração do iodeto: $$\frac{1}{2}I_3^- + e^- \rightarrow \frac{3}{2}I^- \quad (2)$$

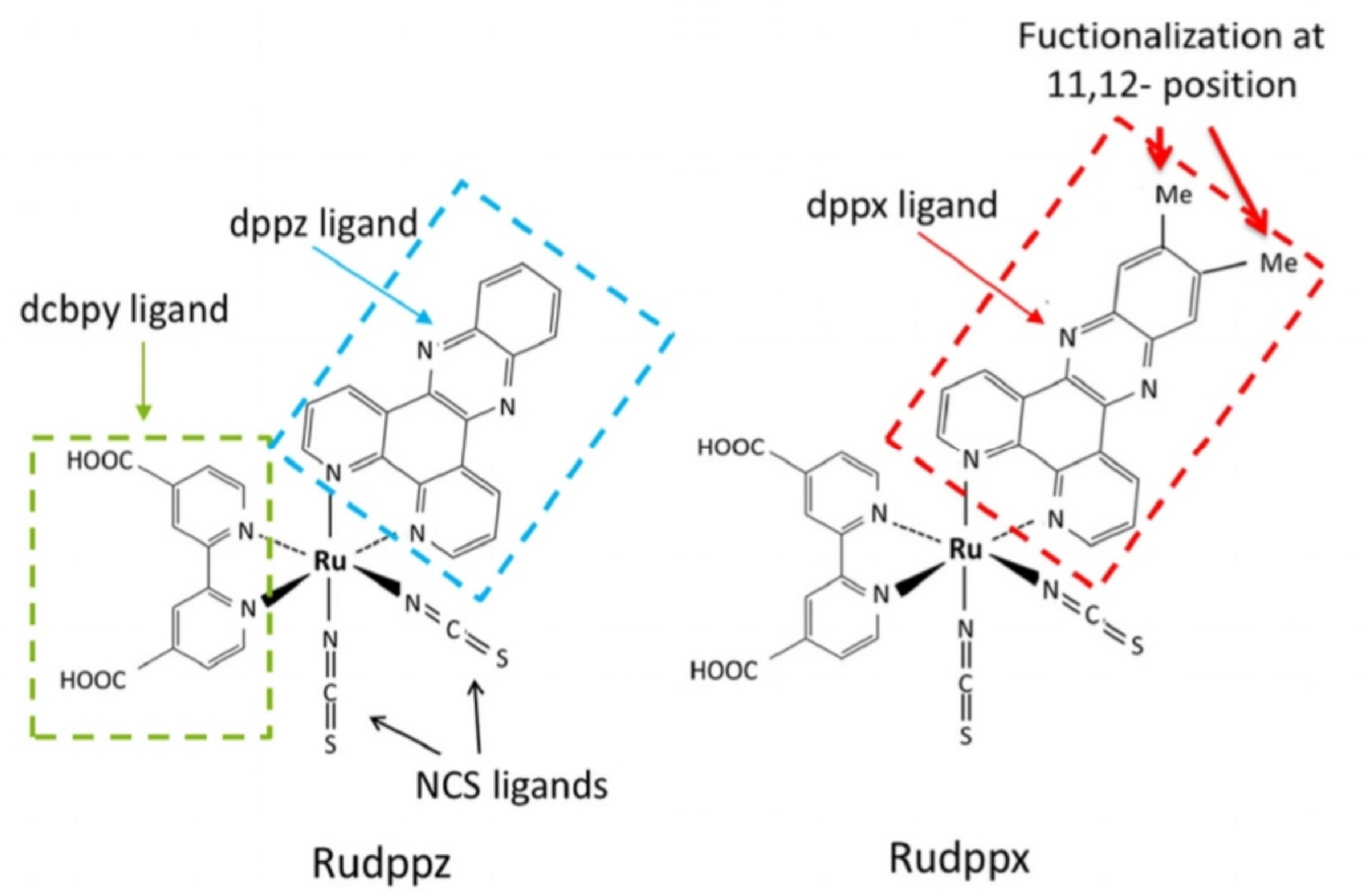
Processos de Recombinação nas DSSC

Perdas que influenciam em valores menores de eficiência

$$(1°)\quad \frac{1}{2}I_3^- + e^-(\text{BC do TiO}_2) \rightarrow \frac{3}{2}I^-$$

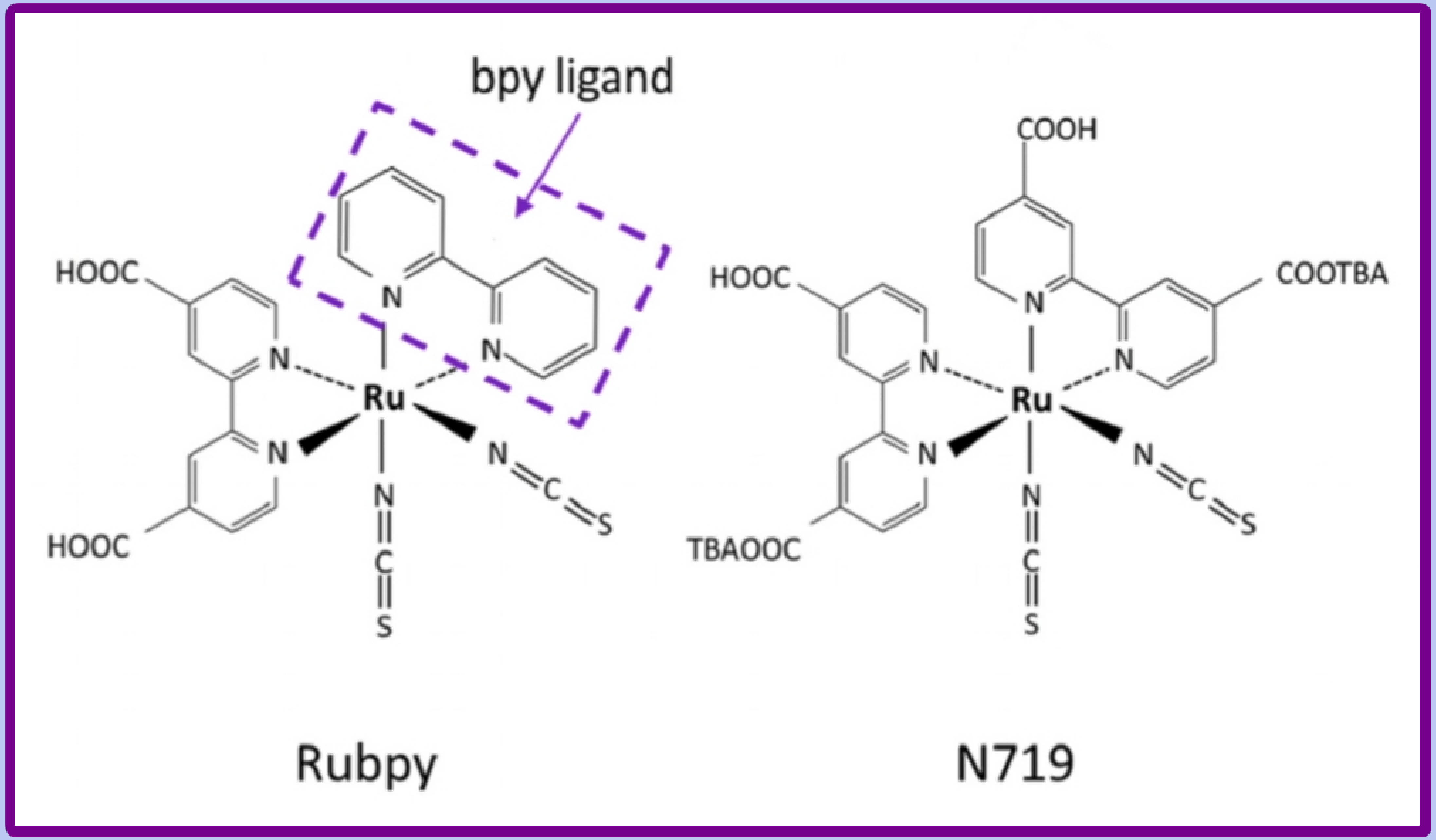
$$(2°)\quad C^+ + e^-(\text{BC do TiO}_2) \rightarrow C$$

Corantes fotoquímicos a base de Rutênio



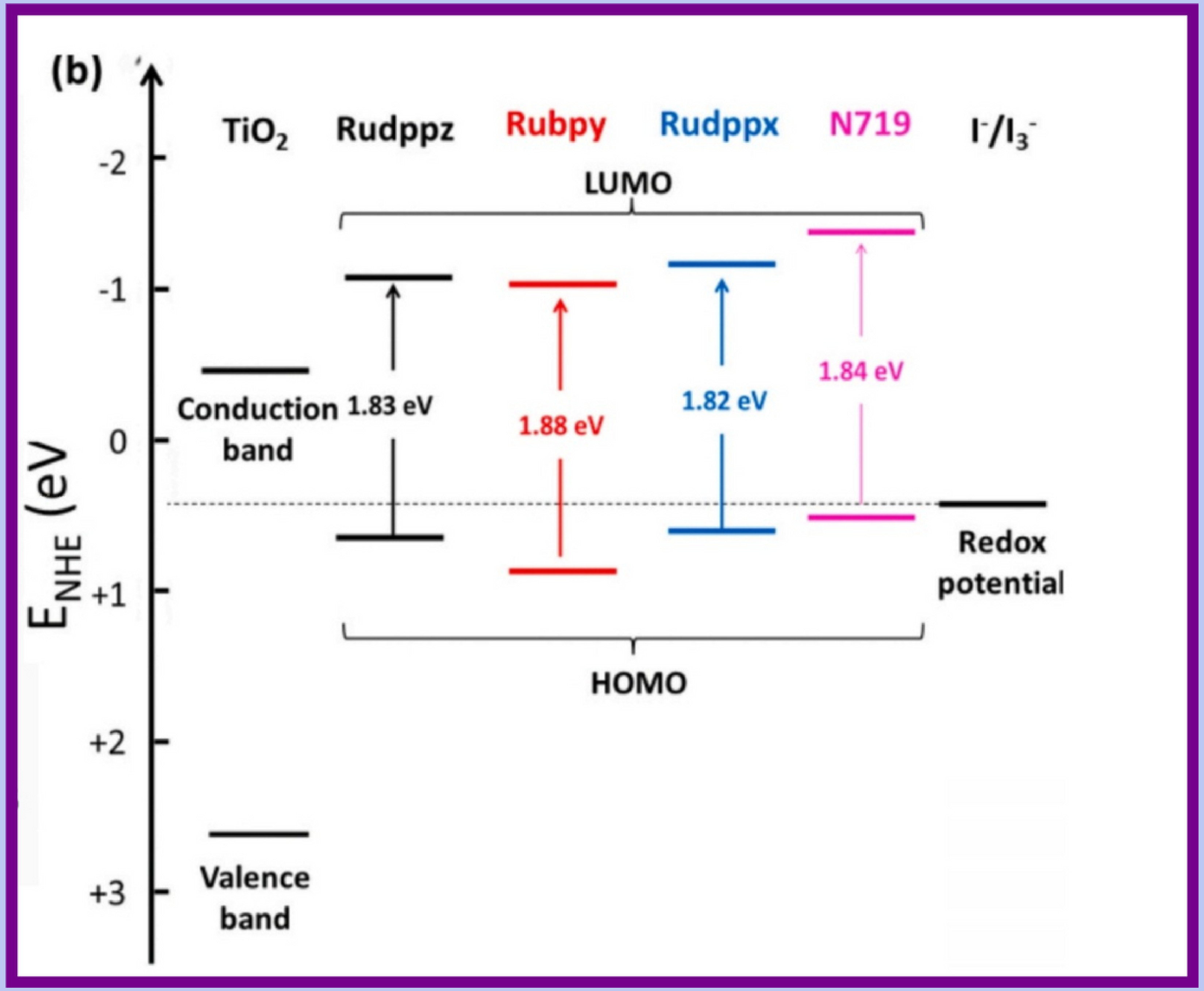
Fonte: Chan (2020)

Corantes fotoquímicos a base de Rutênio



Fonte: Chan (2020)

Entendendo a ação dos corantes



Fonte: Chan (2020)

Entendendo a ação dos corantes

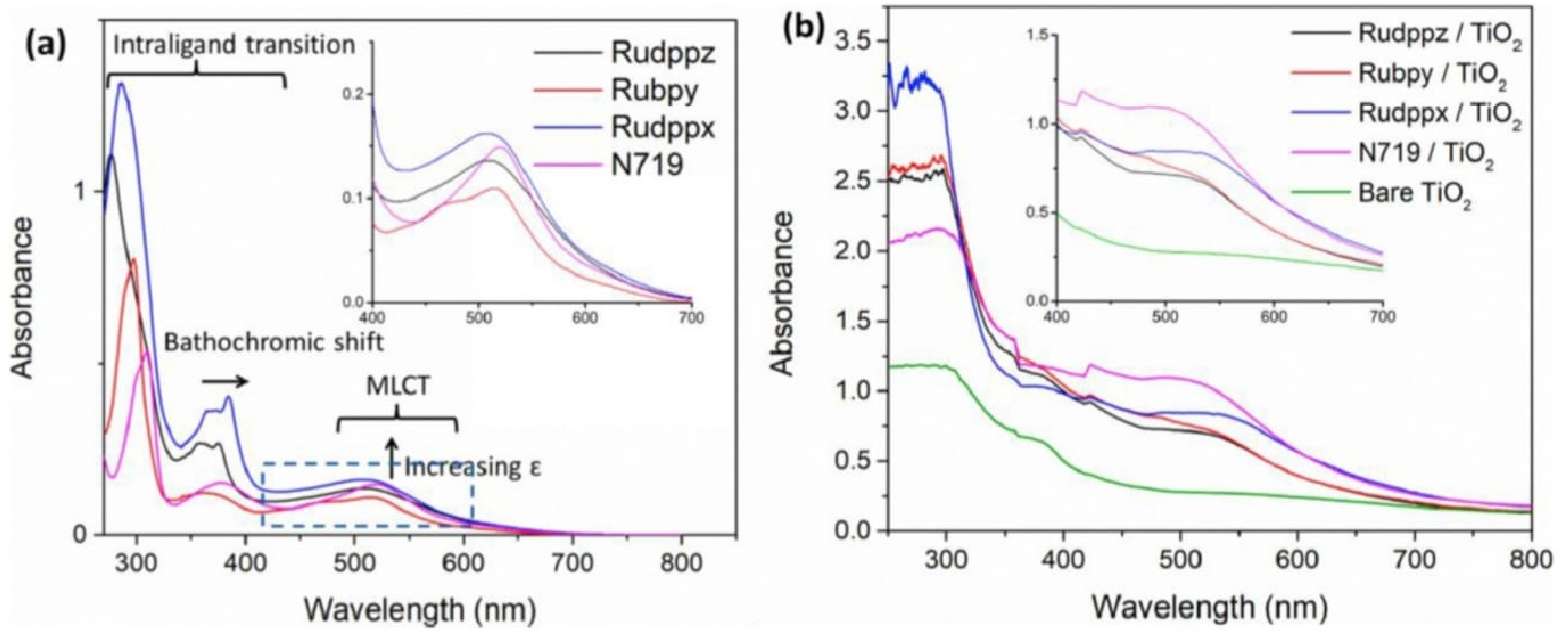
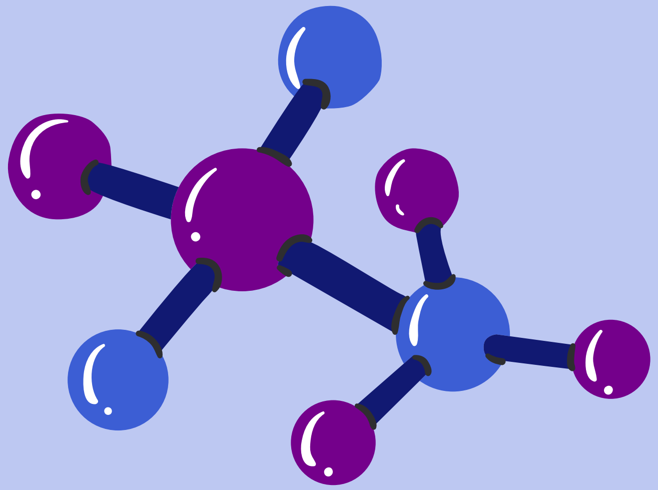


Fig. 3. UV–Vis absorption spectra of Ru-bpy, Ru-dppz, Ru-dppx, and N719 in (a) DMF with concentration of 30 μM and (b) absorbed on TiO_2 thin film.

Fonte: Chan (2020)

Lembre que:

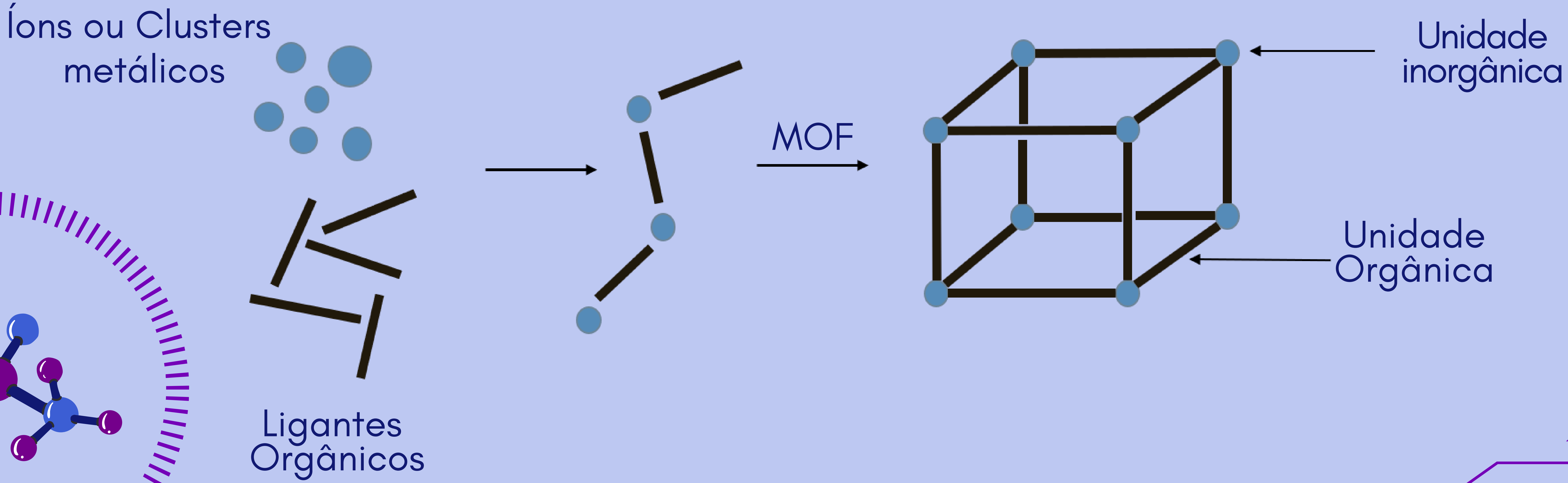
$$E = \frac{hc}{\lambda}$$



MATERIAIS

Metal Organic-Framework (MOF)

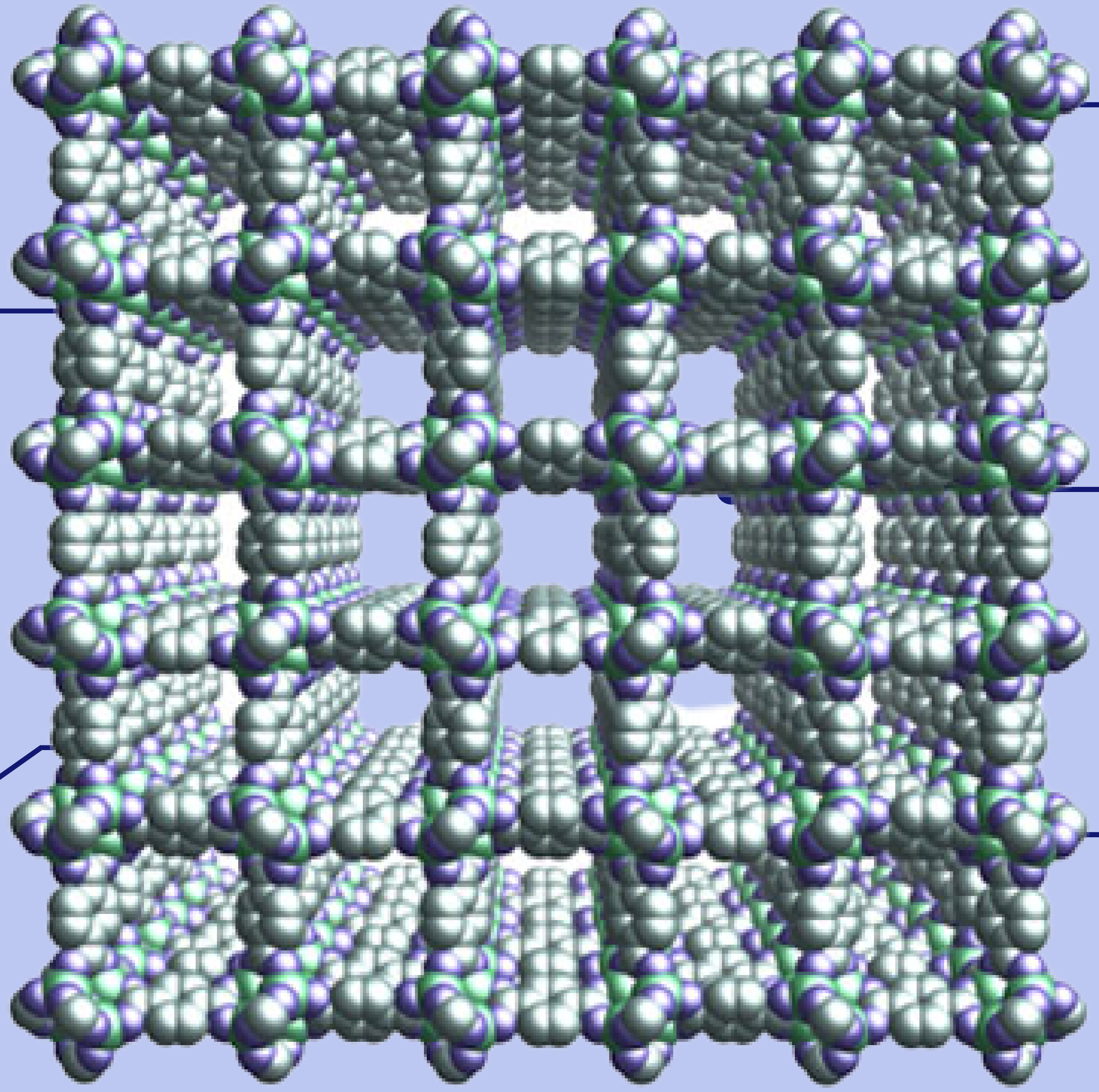
- *" MOF is a cordination network with organic ligands containing potential voids". (Pure Appl. Chem. 85, 1715-1724, 2013)*



Características

Boas estabilidades térmicas e químicas

Baixa densidade



Alta cristalinidade

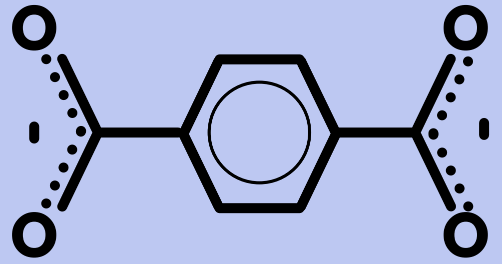
Valores elevados de área superficial

Microporosidade

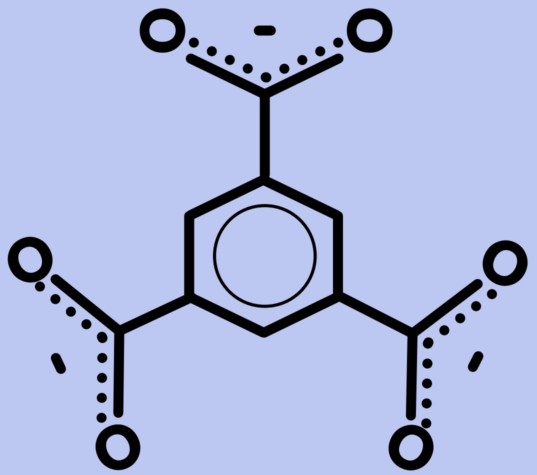
http://yaghi.berkeley.edu

Unidades de construção

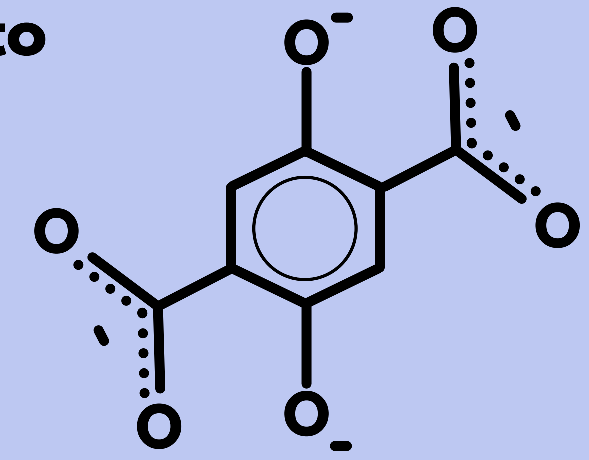
- **ORGÂNICAS**



BDC
1,4-benzenodicarboxilato

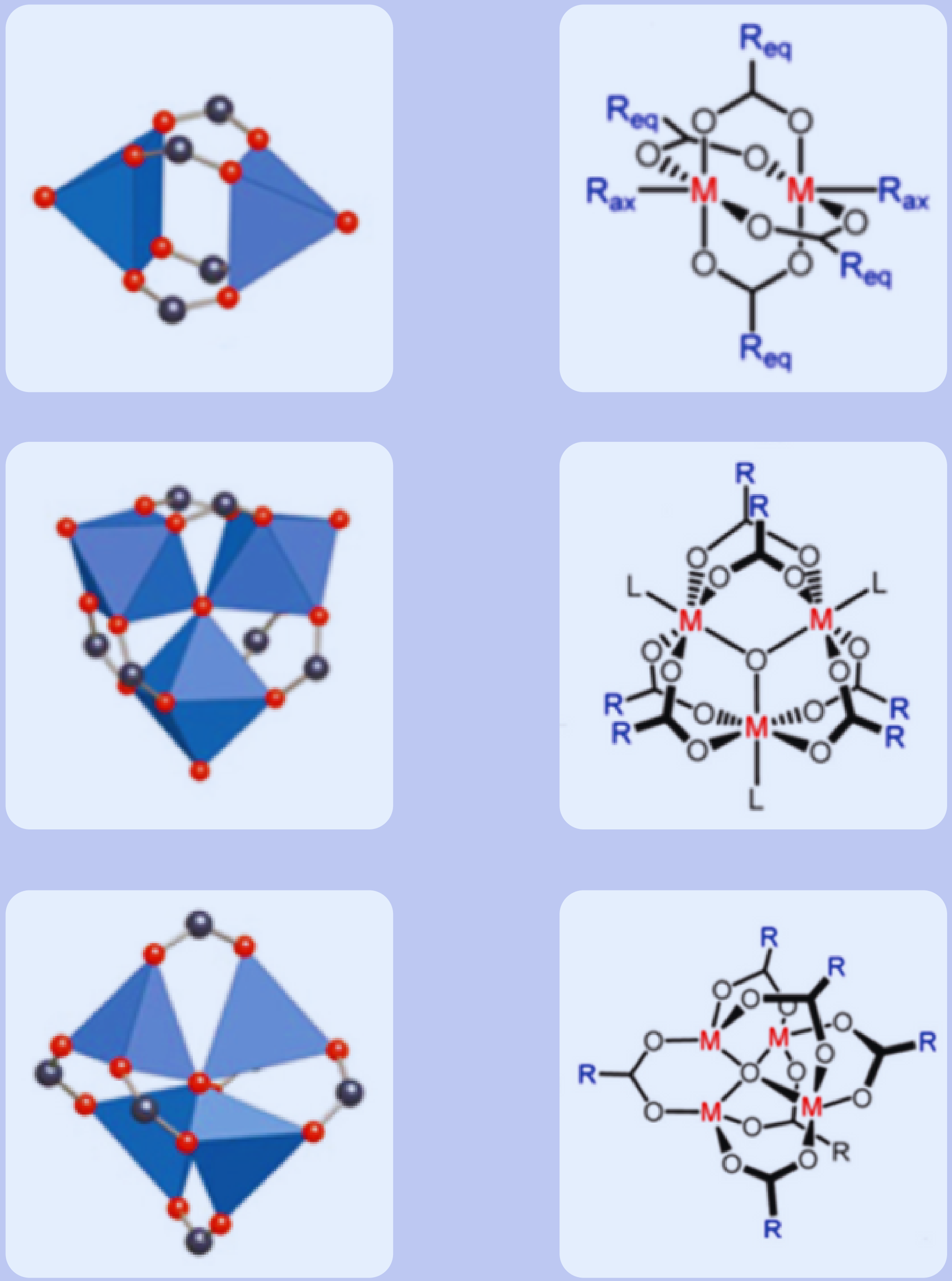


BTC
1,3,5-benzenotriscarboxilato



dobdc
1,4-dioxido - 2,5-benzenodicarboxilato

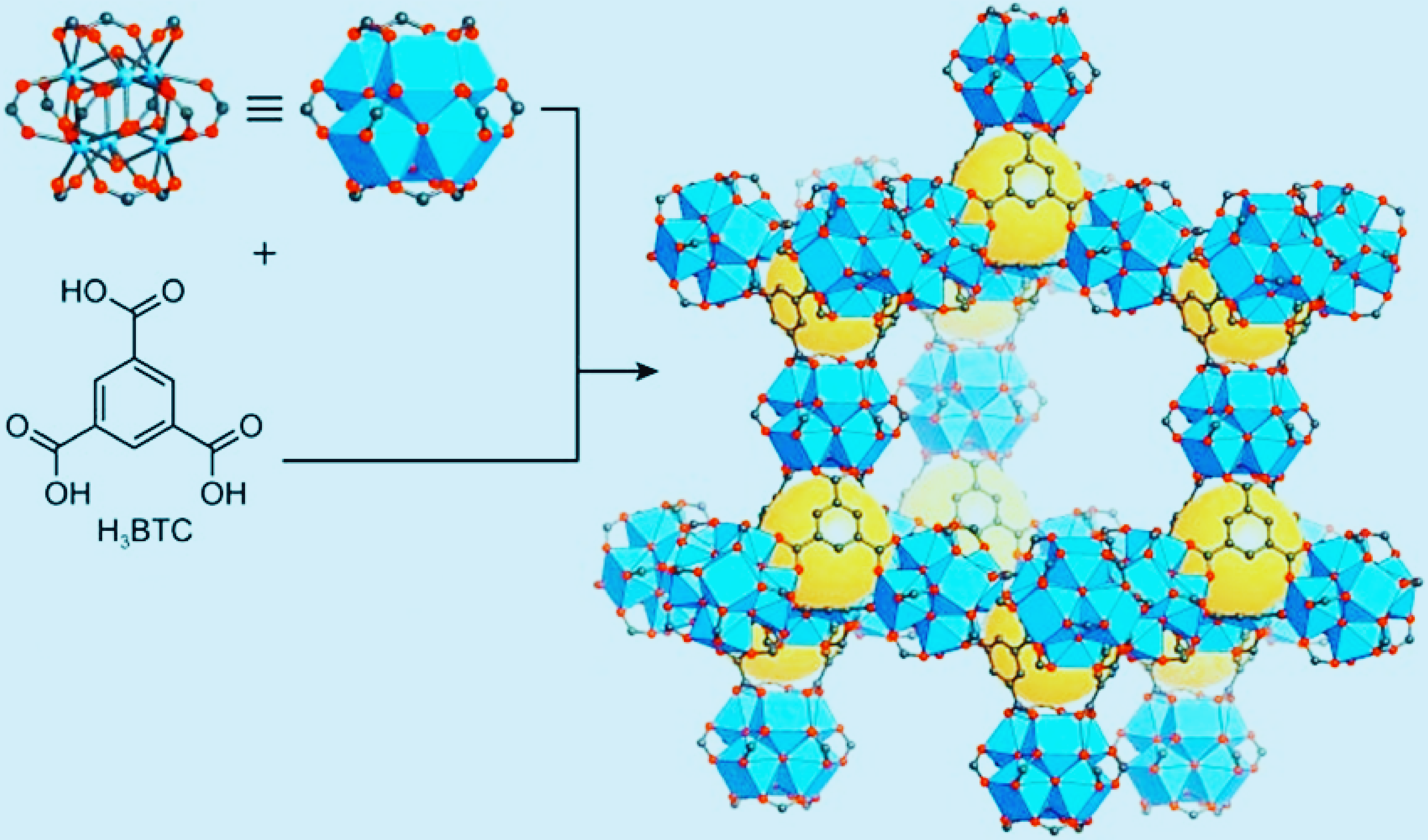
- **INORGÂNICAS**



●oxigênio; ●carbono; **M** metal de transição

https://doi.org/10.1002/9783527821099

Montagem



https://doi.org/10.1002/9783527821099

Aplicações

Tecnologia de sensores

Agentes de liberação controlada de fármacos

Processos de separação de líquidos

Microeletrônica

Purificação, separação e estocagem de gases

Descontaminação em corpos d'água

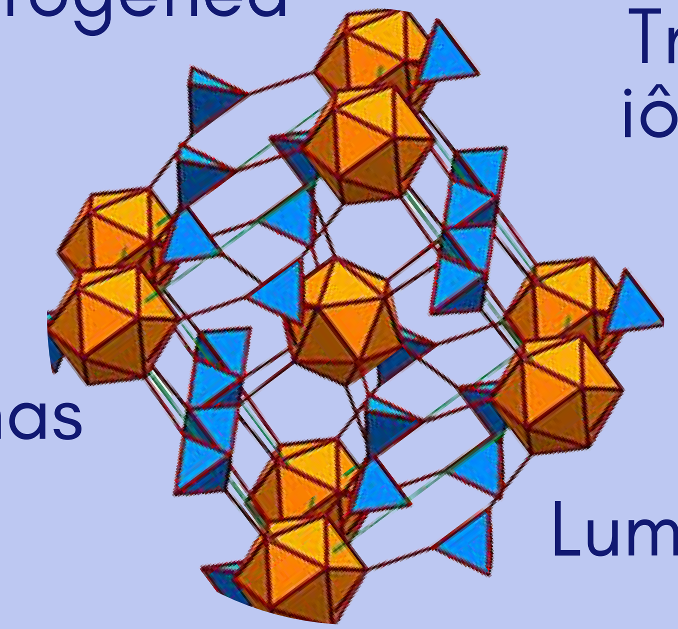
Catálise heterogênea

Troca iônica

Luminescência

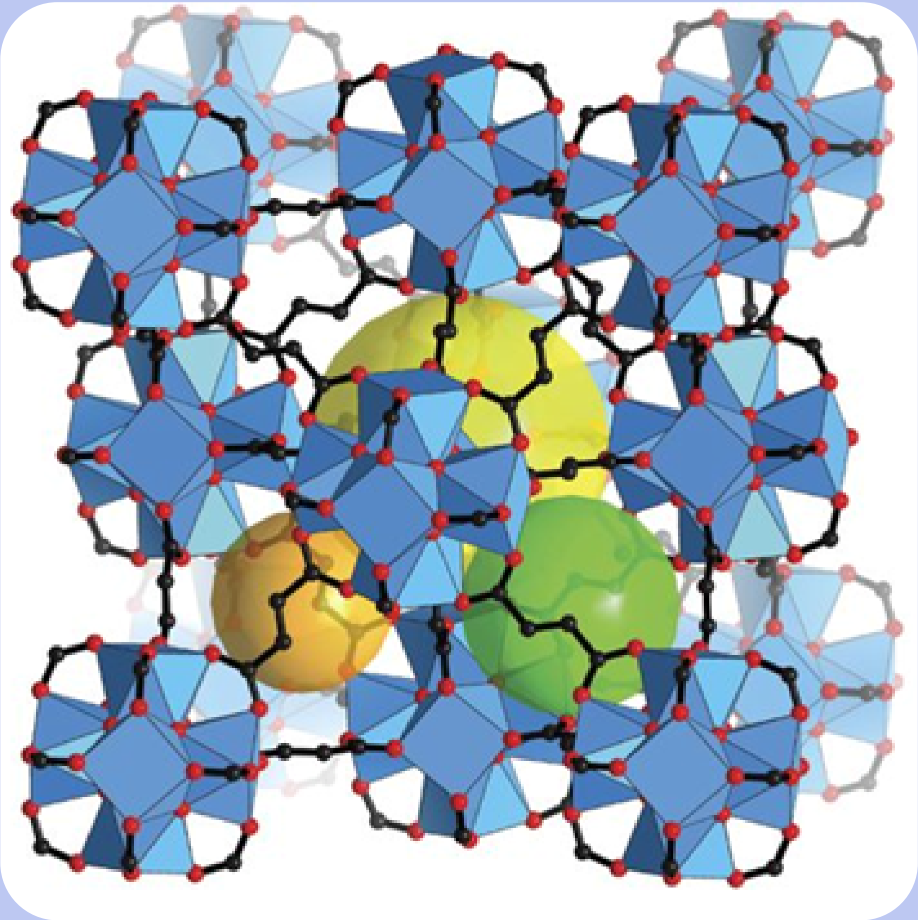
Química fina

Membranas



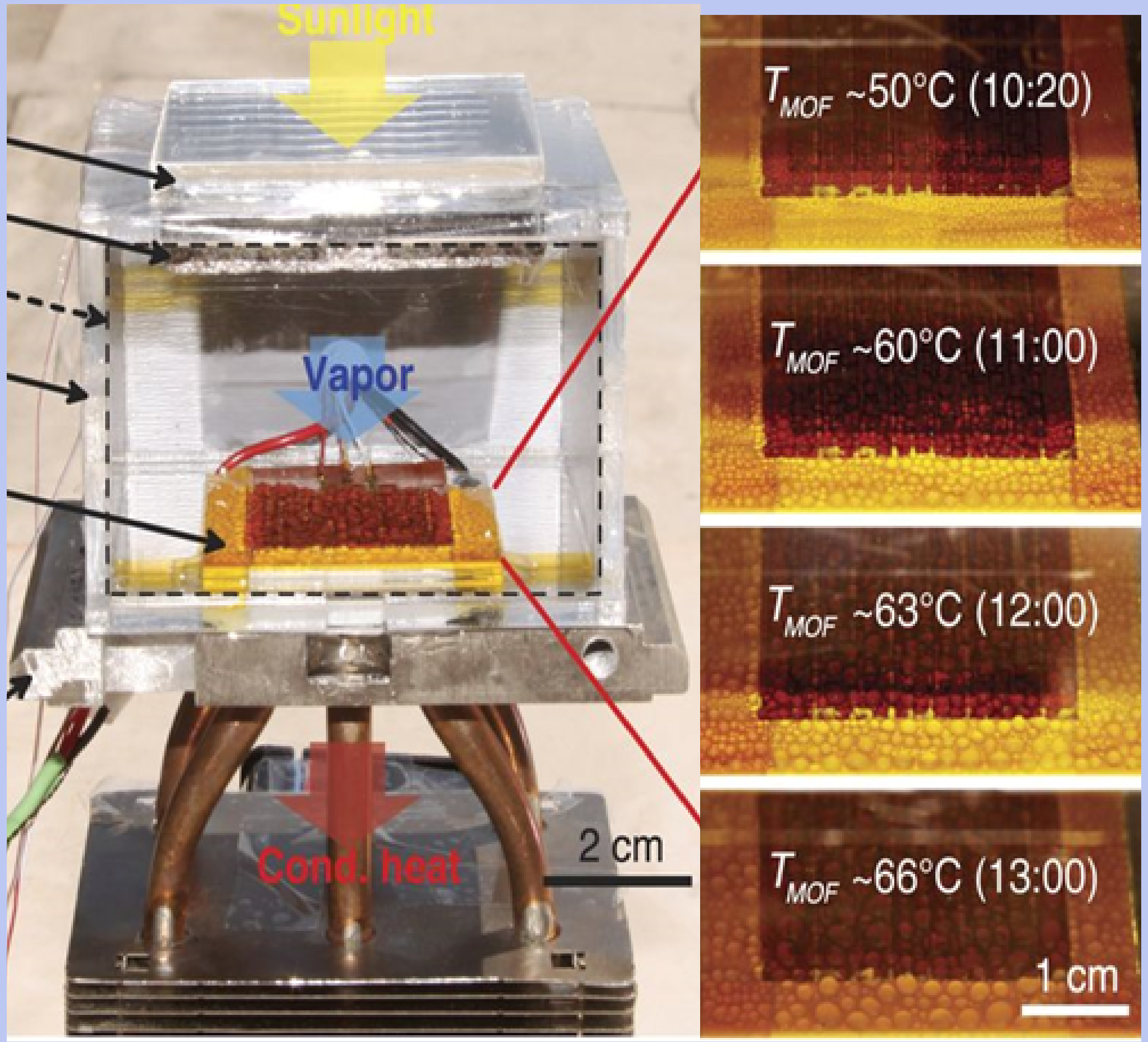
http://yaghi.berkeley.edu

Extração de H_2O atmosférica



MOF 801
$[Zr_6O_4(OH)_4(fumarato)_6]$

Tampa de vidro
Camada de MOF
Janela de exibição
Gabinete reflexivo
Condesador
Dissipador de calor

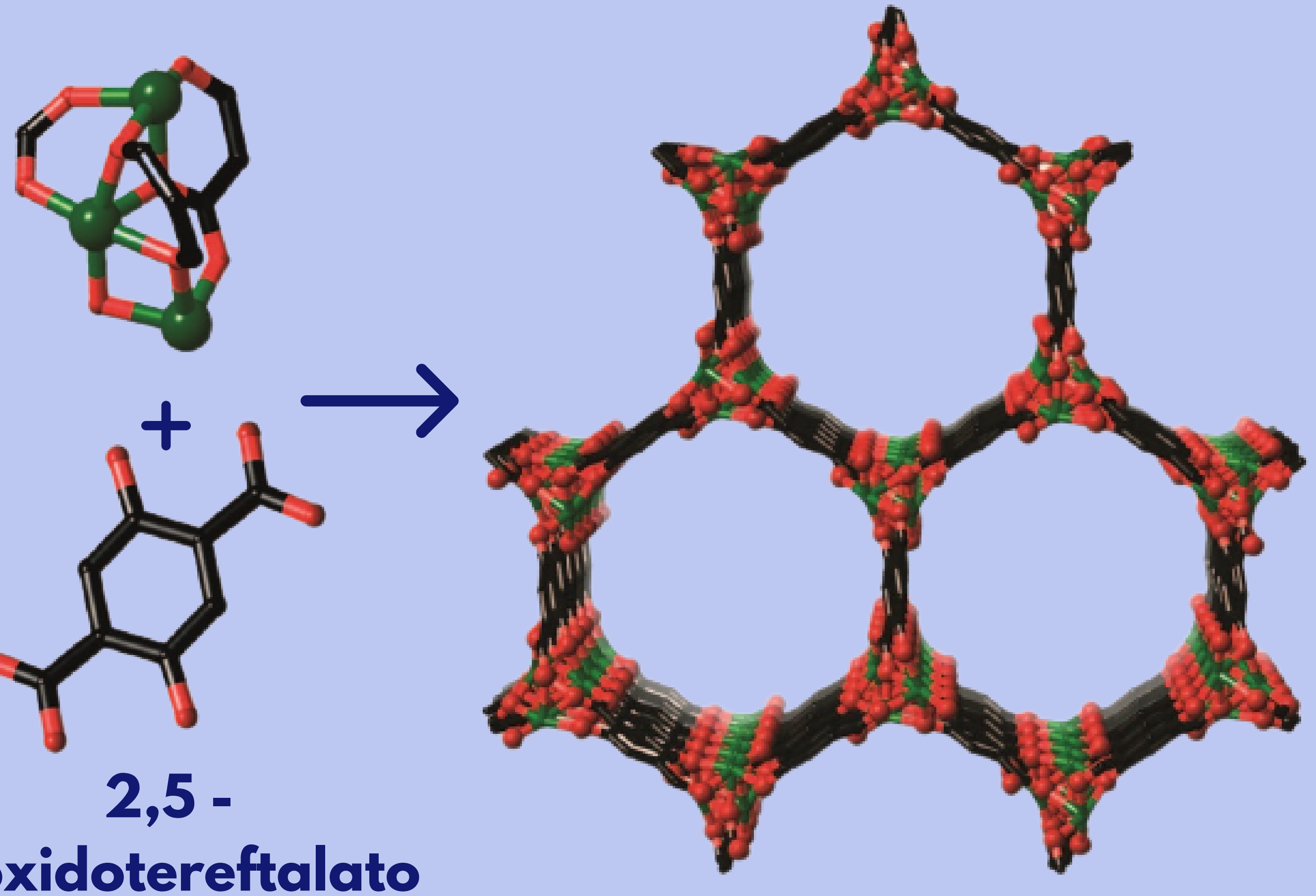


tempo

https://doi.org/10.1038/s41467-018-03162-7

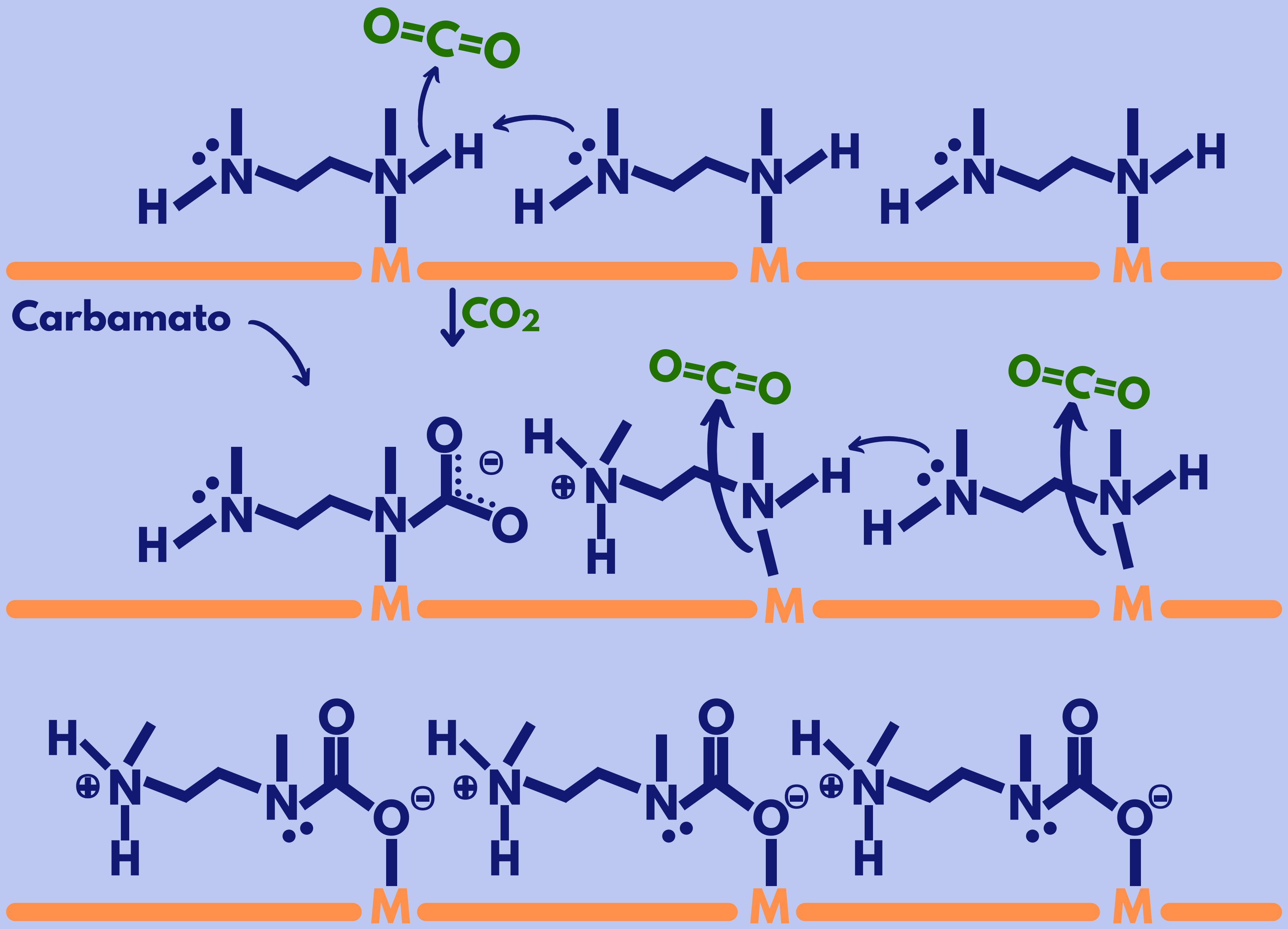
Captação de CO_2 atmosférico

Cluster $Mg_3[(O)_3(CO_2)_3]$



2,5 - dióxidotereftalato

Mg-MOF-74



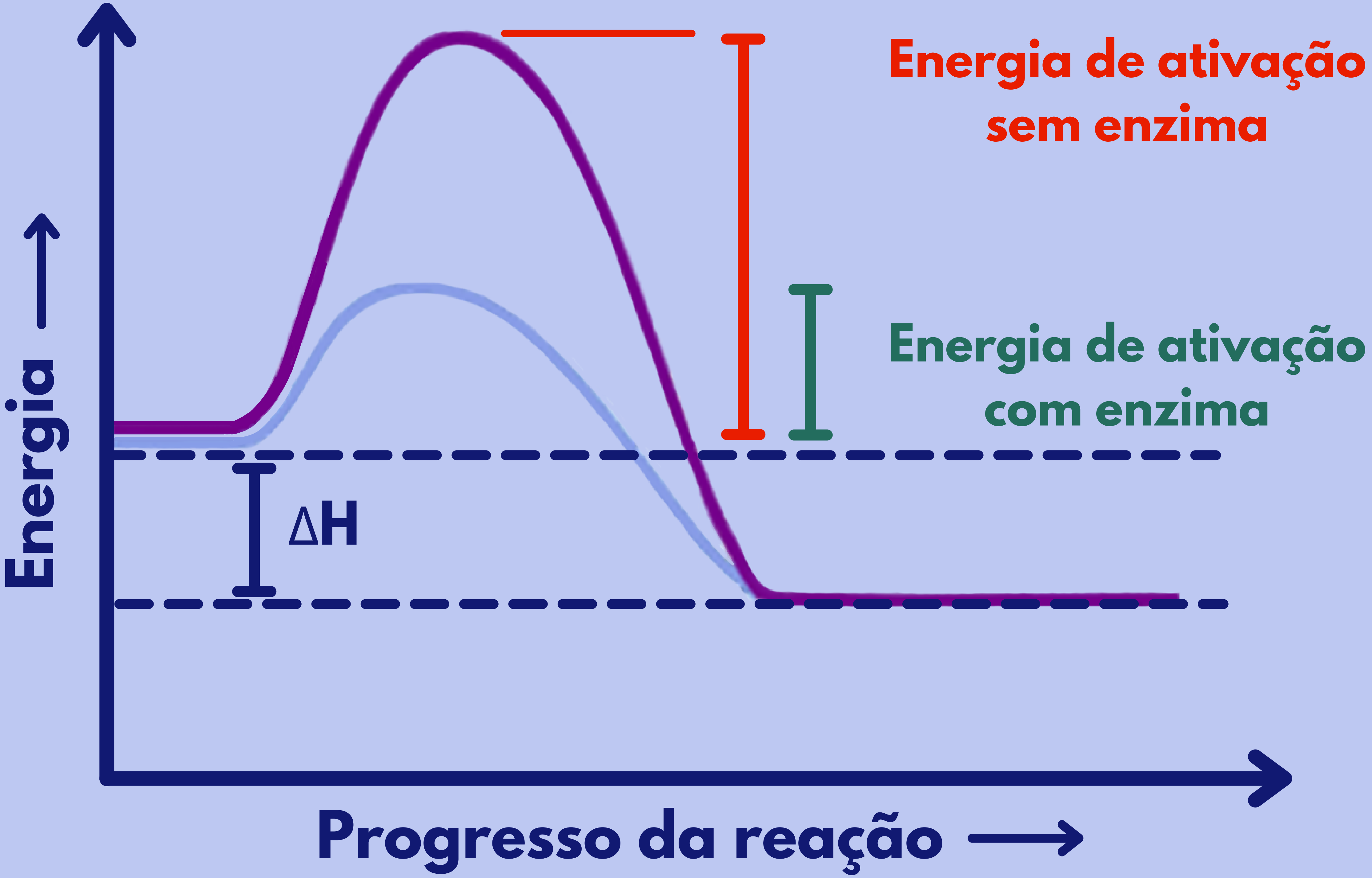
Adaptado de (FERREIRA, 2018)

FÁRMACOS

Síntese Quimioenzimática

- Biocátálise: *"A utilização de um catalisador biológico na conversão de uma molécula que passa por um número reduzido de etapas enzimáticas, sendo o biocatalisador (enzima) o principal agente da reação"*. (*DEMIRJIAN et al., 1999*)

Fonte: https://www.todoestudo.com.br/biologia/enzimas



Adaptado de: https://www.todoestudo.com.br/quimica/catalise

BIOCATÁLISE

Alto valor agregado

BIOCATÁLISE

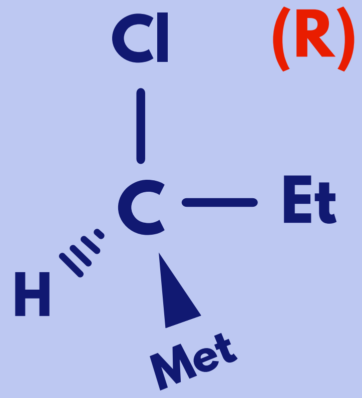
Alto valor agregado

BIOCATÁLISE

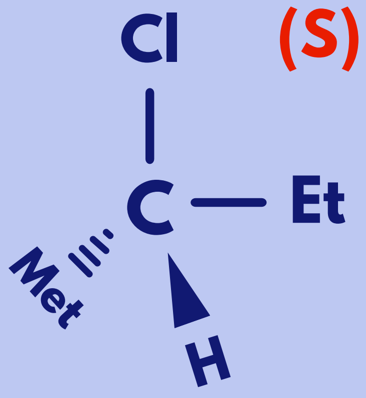
Biodegradáveis e Reutilizáveis

BIOCATÁLISE

- Alto valor agregado
- Biodegradáveis e Reutilizáveis
- Bioativos



(R)



(S)

Estereoespecificidade

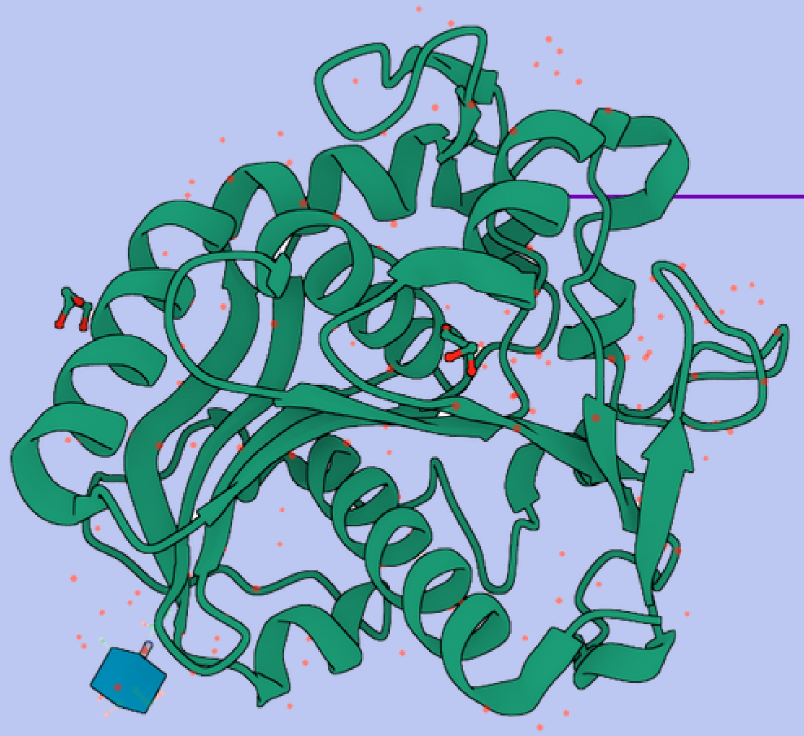
Alto valor agregado

BIOCATÁLISE

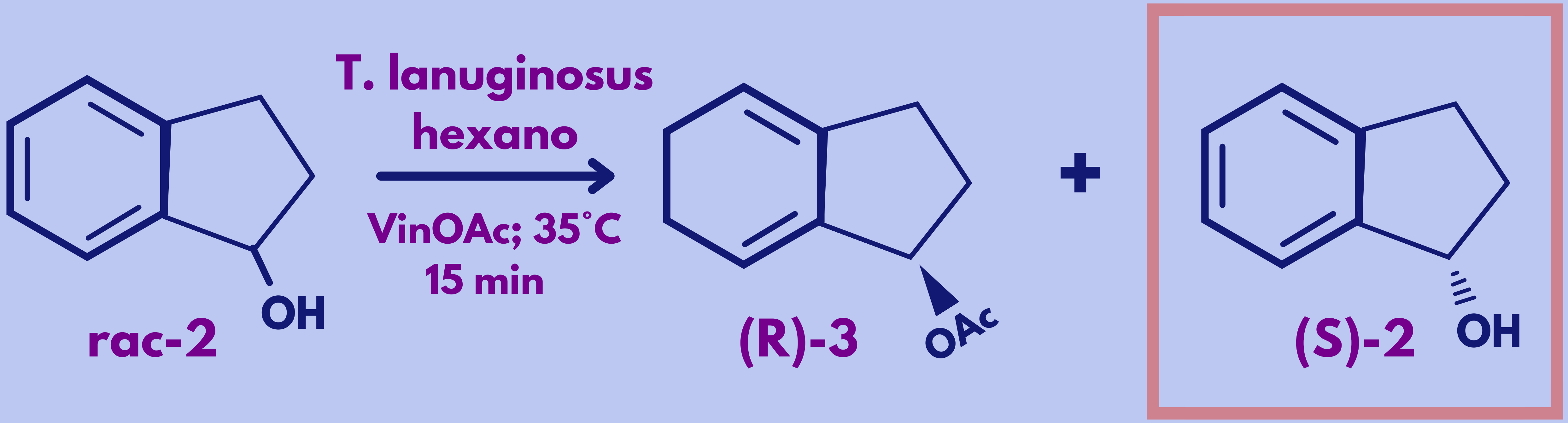
Biodegradáveis e Reutilizáveis

Bioativos

Lipases

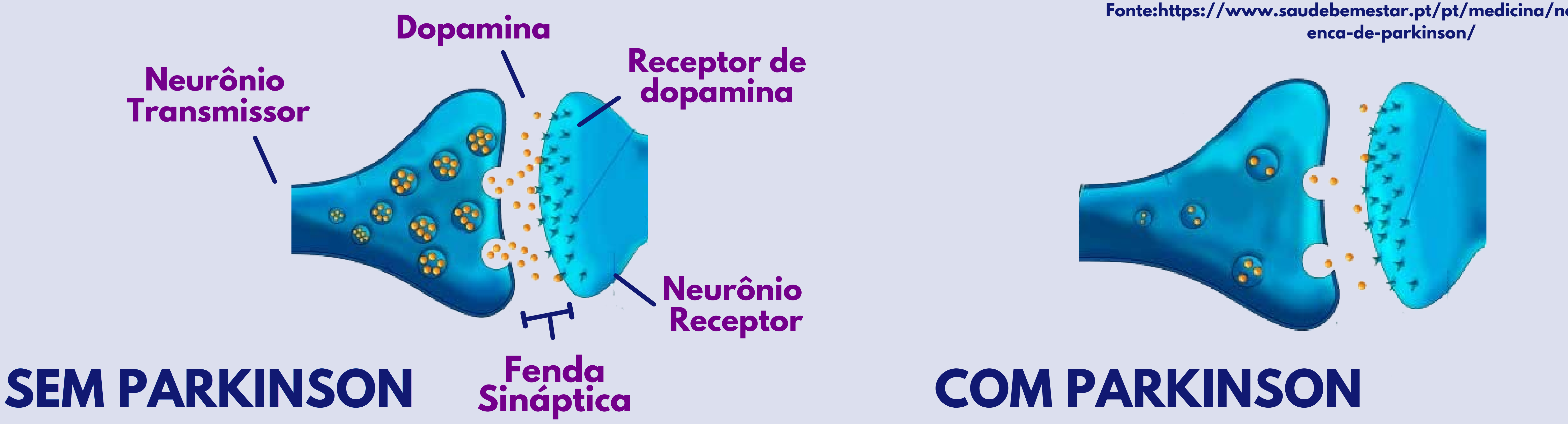


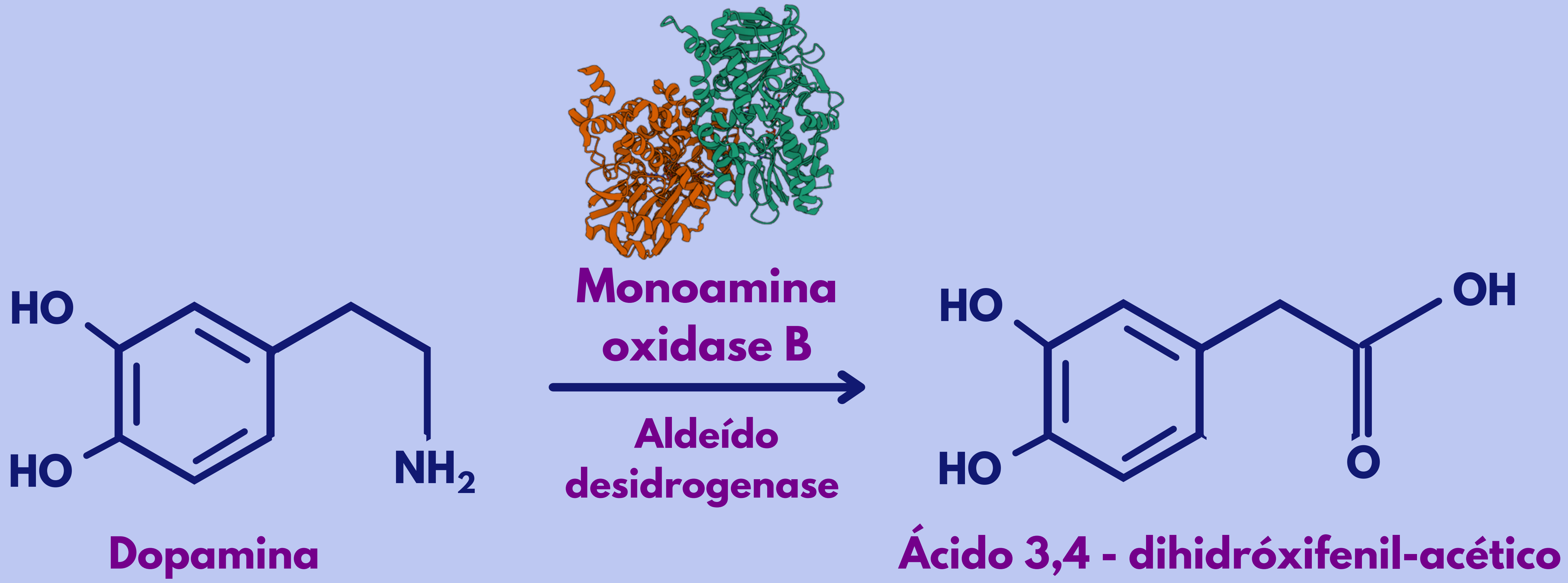
10 ciclos de reuso

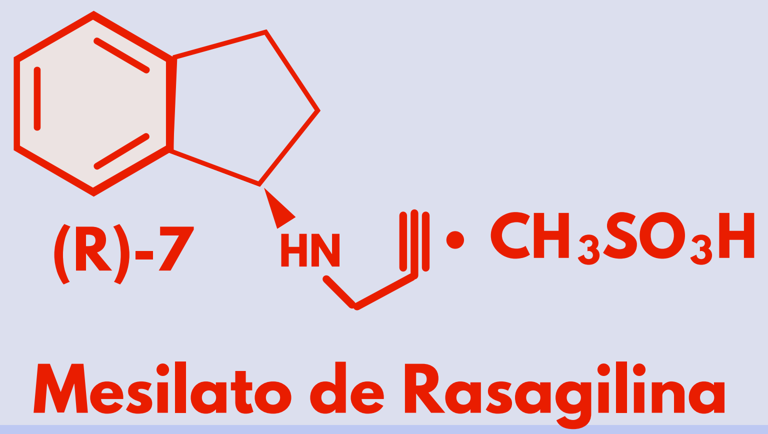


MATTOS , M.C. Chemoenzymatic synthesis of rasagiline mesylate using lipases, Applied Catalysis A: General, v. 492, 2015 . Disponível em: <https://bityli.com/QvK21f>

Fonte:https://www.saudebemestar.pt/pt/medicina/neurologia/doenca-de-parkinson/







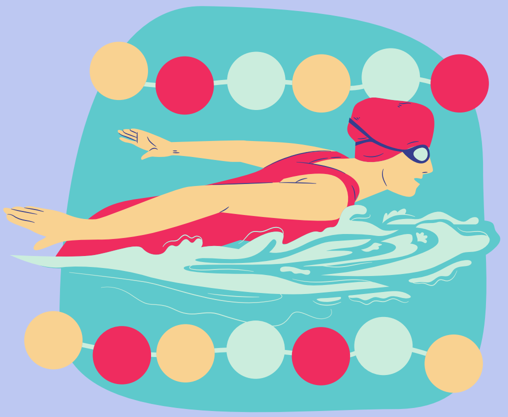
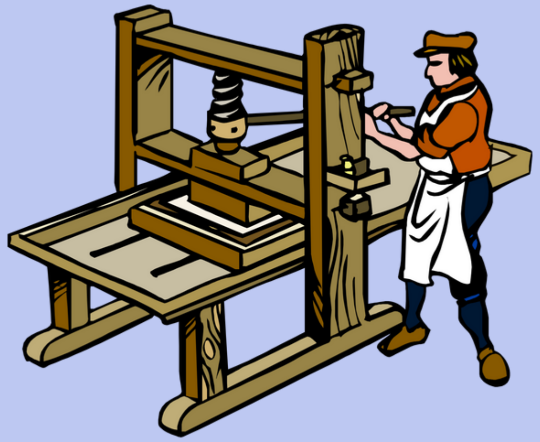
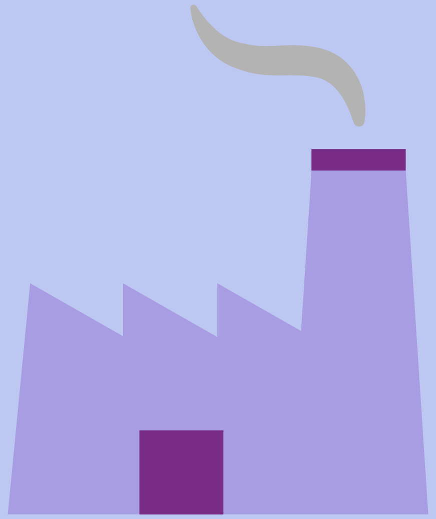
MATTOS , M.C. Chemoenzymatic synthesis of rasagiline mesylate using lipases, Applied Catalysis A: General, v. 492, 2015 . Disponível em: <https://bityli.com/QvK21f>

CIÊNCIA FORENSE

Introdução

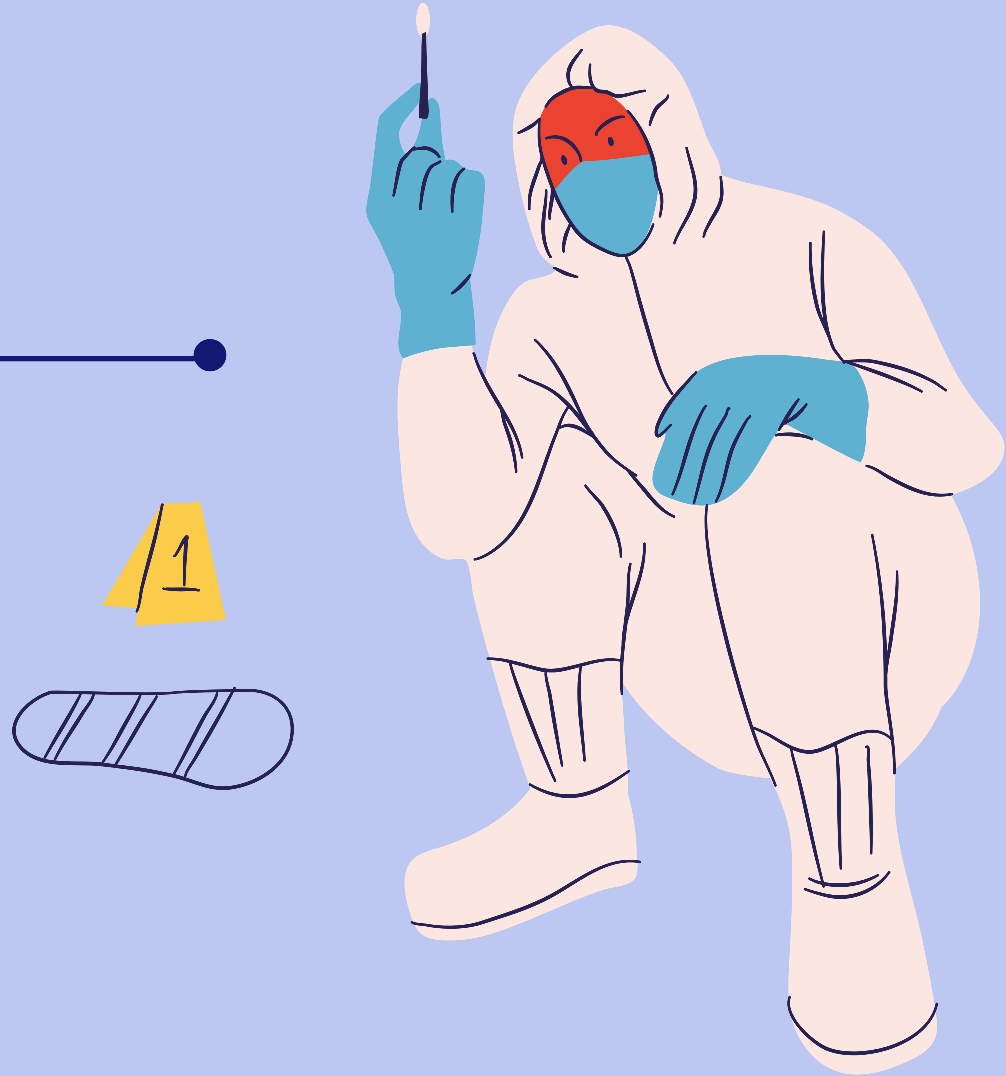
- Atividade que dá suporte às **investigações** que remetem a crimes
- A ciência forense usa dos conhecimentos de **química**, física, matemática, biologia, antropologia, entomologia, entre outros.
- O cientista forense é de suma importância em:



Tecnologias

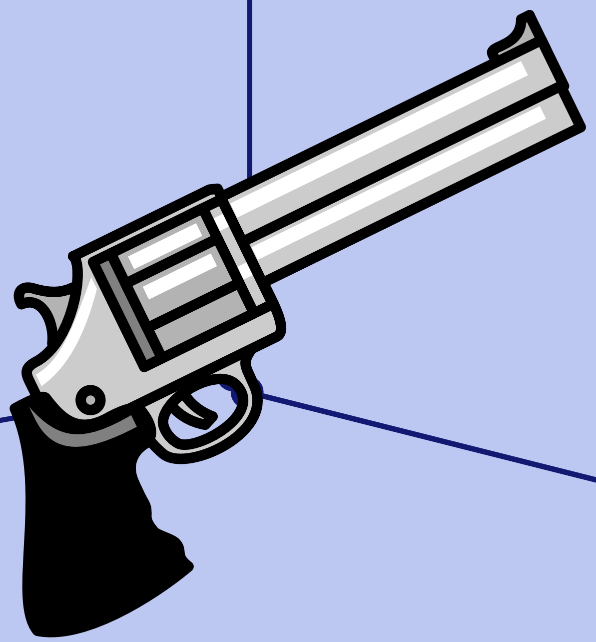
Marcadores Luminescentes



Nanopartículas para revelação de digitais

Marcadores Luminescentes

Utilizados na identificação de resíduos de disparos de armas de fogo

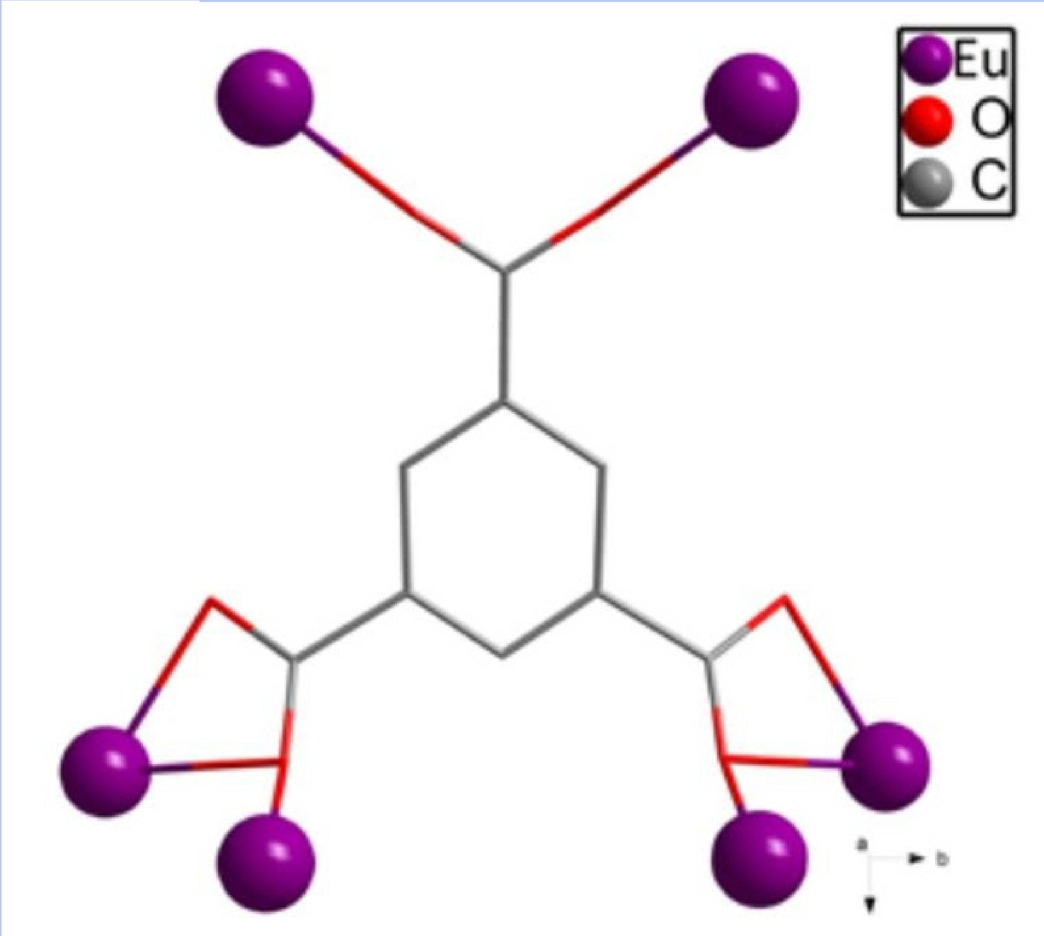


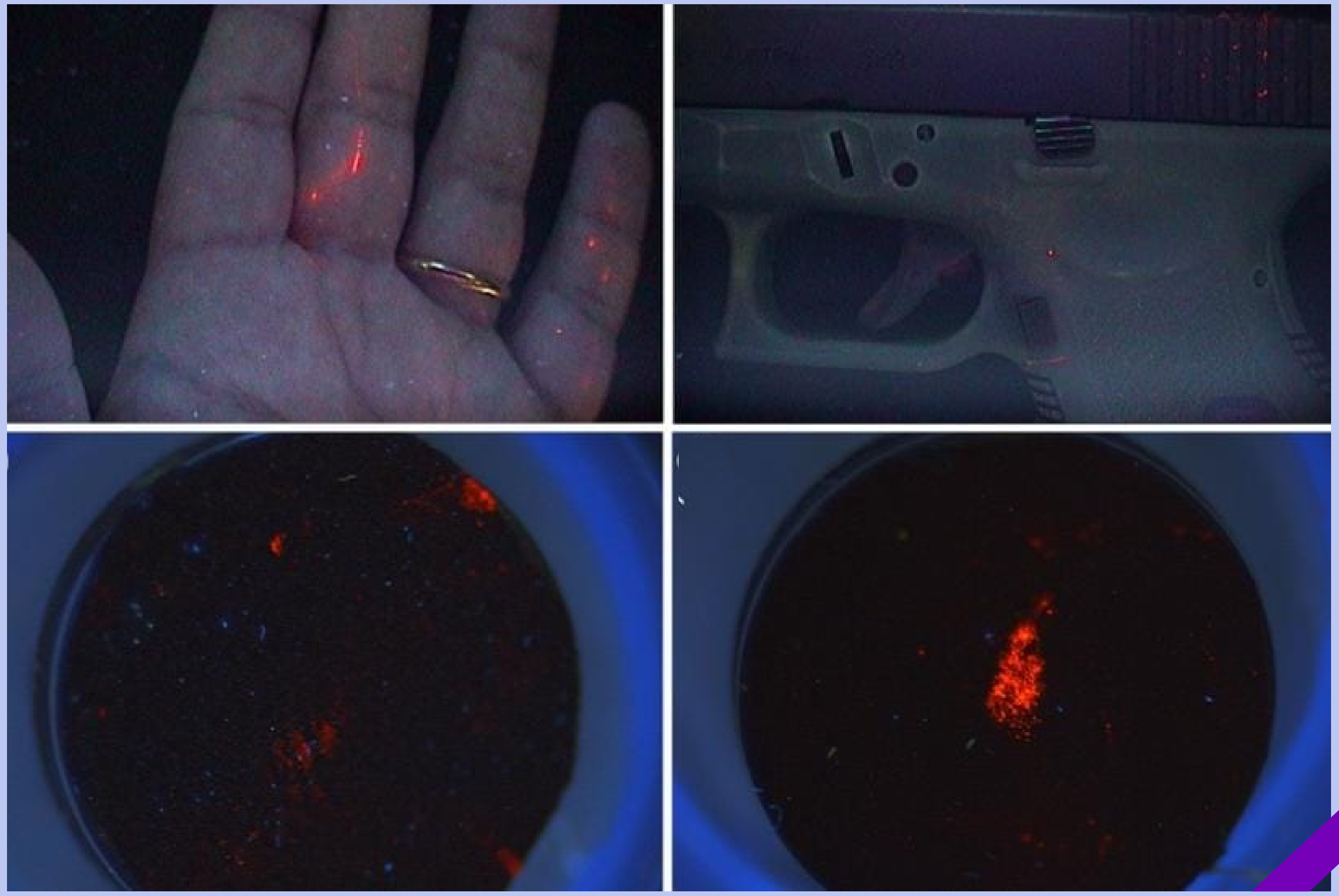
Utiliza-se da Ln-MOF Luminescente [Eu(BTC)]

Introduzida na pólvora, facilitando a sua identificação posterior com lâmpada UV in loco

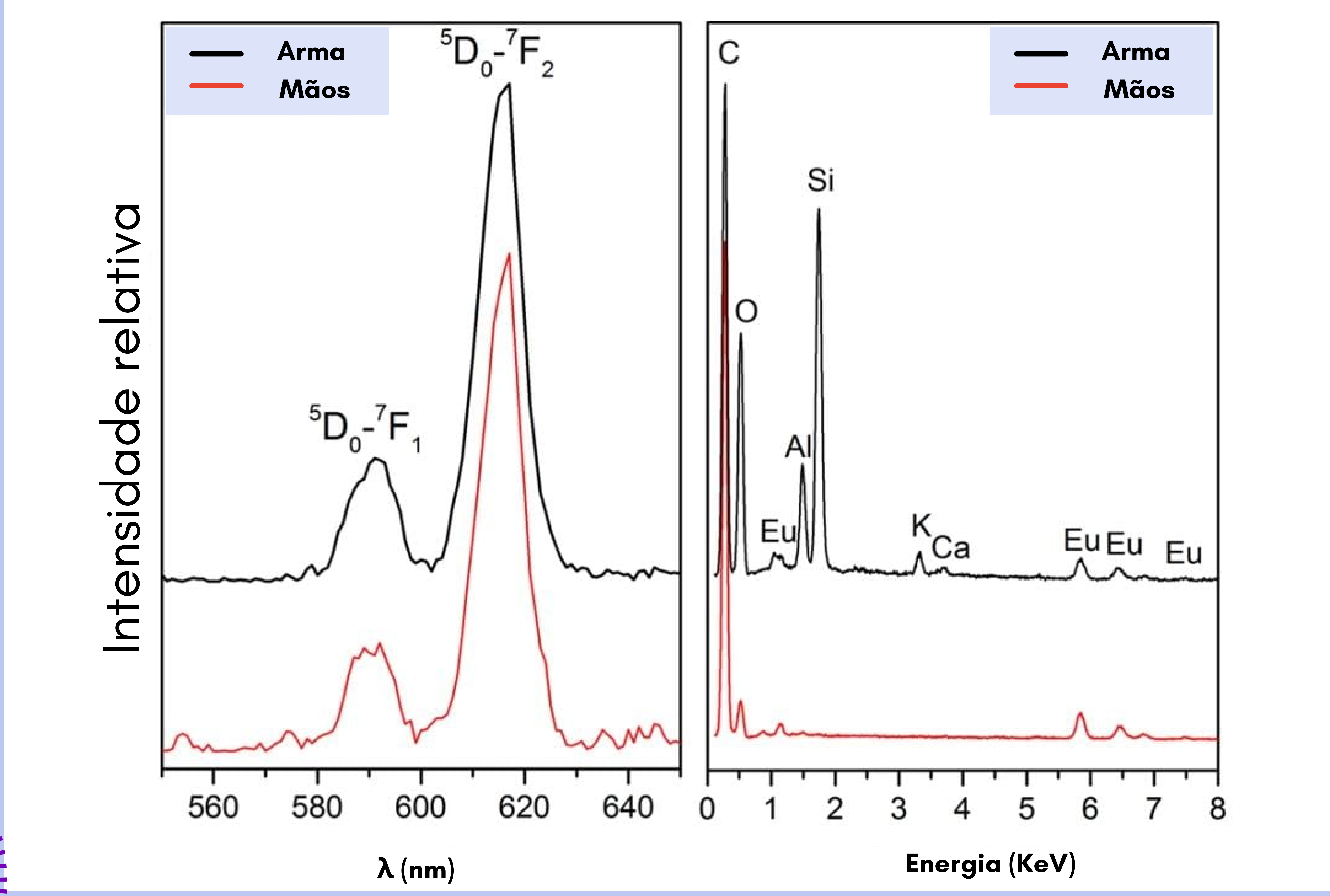
Marcadores Luminescentes

- Dose letal de 5000 mg/kg
- Utilizada a Gd por algumas polícias europeias





Marcadores Luminescentes

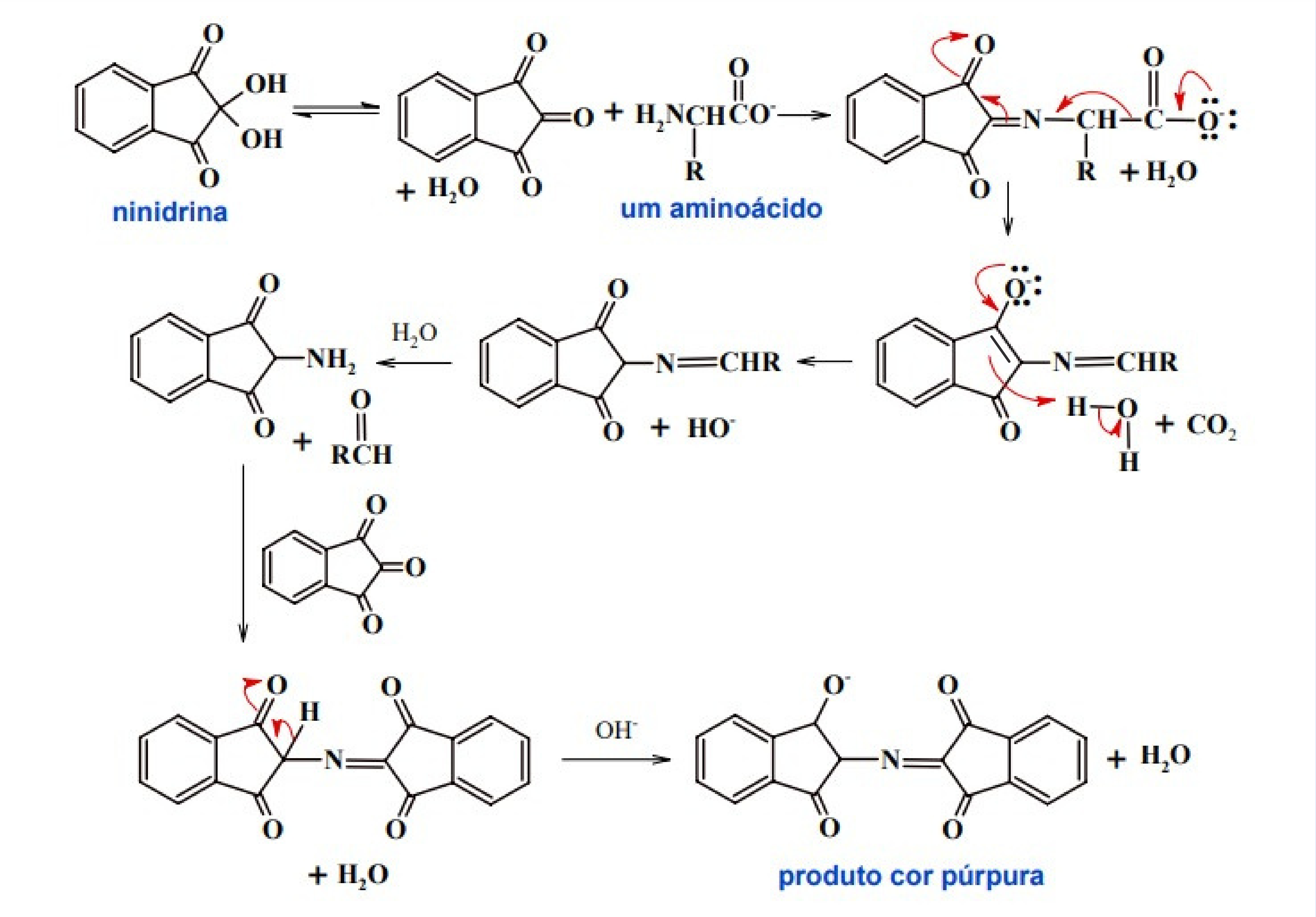


Espectro de Emissão

EDS (Espectroscopia por Energia Dispersiva)

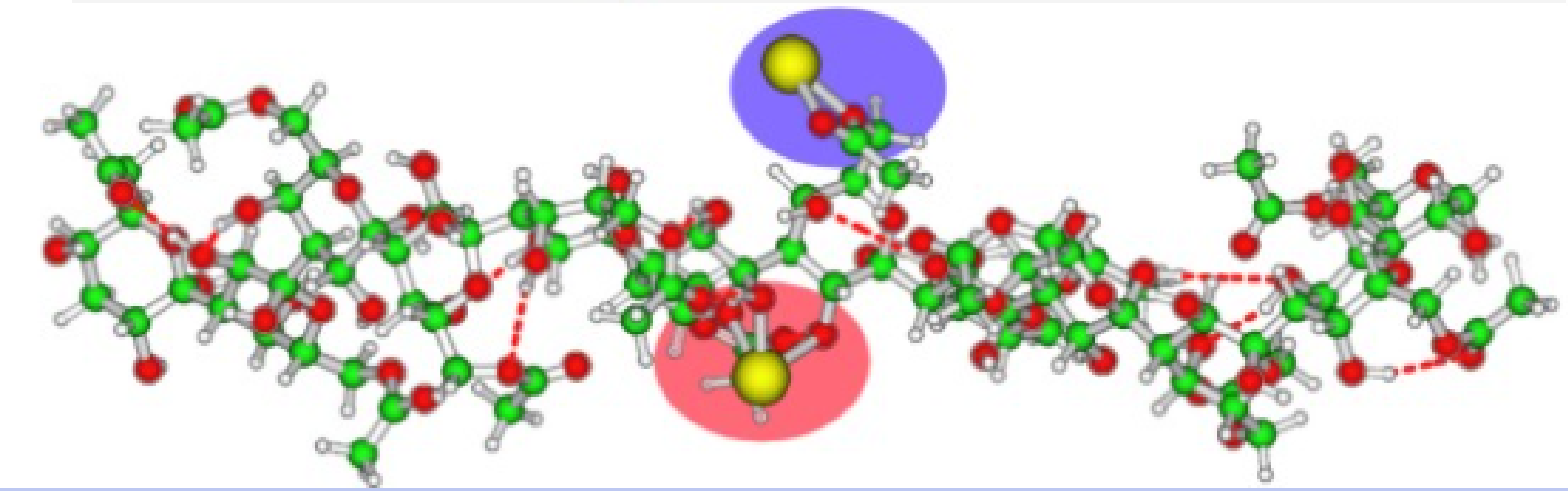
Ninidrina

- Utilizada na visualização de impressões digitais
- Pulverizada sobre a superfície
- Carcinogênica
- Tóxica



Mecanismo da reação de um aminoácido com a ninidrina para formação de um produto colorido

Nanopartículas (ACG-AgNPs)



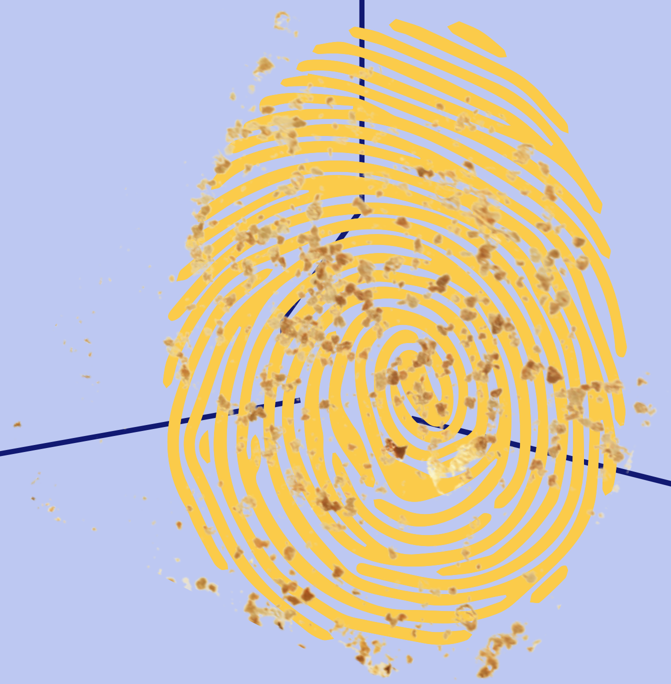
Vermelho = Oxigênio
Branco = Hidrogênio
Verde = Carbono
Amarelo = Prata

Nanopartículas

- Utilizada na visualização de impressões digitais
- O suporte é mergulhado na suspensão de nanopartículas e então secado

Nanopartículas (ACG-AgNPs)

Baixa toxicidade



Impressão digital se torna visível mais rapidamente

Baixo custo

Processos para identificação

- Utilização de câmera digital para registro
- AFIS (Automated Fingerprint Identification System) e Photoshop

Fonte: Brandão (2020)

Quiz time

BIBLIOGRAFIA

- DE ALMEIDA, Anderson Soares et al. Hidrogênio, o combustível do futuro. Diversitas Journal, v. 4, n. 2, p. 356-366, 2019.
- SOUZA FILHO, Hélio Nunes de et al. " Power-to-gas": produção de hidrogênio através da energia elétrica de fontes renováveis e sua injeção na rede de gás natural brasileira. 2021.
- YAGHI, Omar M.; KALMUTZKI, Markus J.; DIERCKS, Christian S. Introductionto Reticular Chemistry. [S. l.: s. n.]. E-book. Disponível em: https://doi.org/10.1002/9783527821099
- KIM, Hyunho *et al.*Adsorption-based atmospheric water harvesting device for arid climates. Nature Communications, *[S. l.]*, v. 9, n. 1, p. 1–8, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1038/s41467-018-03162-7
- FERREIRA, G. F. A química das redes metal-orgânicas e seu potencial em questões ambientais, 2018.
- SONAI, Gabriela G. et al. Células solares sensibilizadas por corantes naturais: um experimento introdutório sobre energia renovável para alunos de graduação. Química Nova, v. 38, p. 1357-1365, 2015.

BIBLIOGRAFIA

- CHAN, K. F. et al. Photovoltaic performance of bipyridine and dipyridophenazine ligands anchored ruthenium complex sensitizers for efficient dye-sensitized solar cells. Solid State Sciences, v. 107, p. 106368, 2020.
- MATTOS, M.C. Chemoenzymatic synthesis of rasagiline mesylate using lipases, Applied Catalysis A: General, v. 492, 2015.
- DEMIRJIAN, D. C.; SHAH, P. C.; MORIS-VAS, F. From discovery to application. Biocatalysis, v. 200, p. 1-29, 1999.
- BRANDÃO, Marcela de S. et al. Acetylated cashew-gum-based silver nanoparticles for the development of latent fingerprints on porous surfaces. Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management, v. 14, p. 100383, 2020.
- LUCENA, Marcella AM et al. Application of the metal-organic framework [Eu (BTC)] as a luminescent marker for gunshot residues: a synthesis, characterization, and toxicity study. ACS applied materials & interfaces, v. 9, n. 5, p. 4684-4691, 2017.

OBRIGADO!!!

@petquimicaufc