

# Estudo de Prospecção em Química Computacional

## *Prospect Study in Computational Chemistry*

*Eric José Braga Ferreira*<sup>1</sup>

*Pedro Vitor Dos Santos*<sup>1</sup>

*Júlio Cosme Santos Da Silva*<sup>1</sup>

*Josealdo Tonholo*<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL, Brasil

### Resumo

Química computacional é uma área da química em crescimento, fazendo uso, dentre outros, de métodos de química quântica e mecânica molecular para investigar detalhadamente processos químicos. Devido o aumento na capacidade de processamento e armazenamento dos computadores, juntamente com a elaboração de algoritmos mais eficientes, a química computacional é atualmente uma ferramenta atrativa para estudos em física, engenharia, materiais e biologia. Se por um lado a química computacional ocupa um lugar de destaque em pesquisa acadêmica, o mesmo não é verdade no campo da proteção intelectual. Entretanto, devido ao caráter multidisciplinar, acredita-se que o químico computacional pode contribuir na geração de produtos tecnológicos. Portanto, o objetivo central deste trabalho foi analisar, via levantamento do depósito de patentes, o cenário atual envolvendo a aplicação da química computacional em estudos de interesse comercial. Os dados coletados evidenciaram uma realidade negativa neste cenário, o que pode gerar um vasto campo para ser explorado.

Palavras-chave: Química Computacional. Propriedade Intelectual. Patentes.

### Abstract

Computational chemistry is an area of chemistry in growing, making use, among others, of quantum chemistry and molecular mechanics methods to investigate in detail chemical processes. Due to the increase in processing and storage capacity of computers, together with development of more efficient algorithms, computational chemistry is currently an attractive tool for studies in physics, engineering, materials and biology. If on the one hand computational chemistry occupies a prominent place in academic research, same is not true in the field of intellectual protection. However, due to the multidisciplinary nature, we believe that computational chemist can contribute to generation of technological products. Therefore, the main aim of this work was to analyze, through a survey of the patent deposit, the current scenario involving the application of computational chemistry in studies of commercial interest. Collected data evidenced a negative reality in this scenario, which can generate a vast field to be explored.

Keywords: Computational Chemistry. Intellectual Property. Patents.

Área tecnológica: Química e Física



# 1 Introdução

O desenvolvimento e aplicação de métodos de química computacional para investigação de diferentes sistemas químicos têm contribuído de maneira bastante significativa para o avanço da ciência química como um todo. Atualmente, a química computacional é definida como uma área da química moderna que faz uso de métodos teóricos, baseados em distintos formalismos matemáticos e aproximações físicas, os quais são transcritos para linguagens de programação adequadas e incorporados a eficientes programas de computadores para permitir o cálculo de propriedades de sistemas moleculares e sólidos (CRAMER, 2004). Com o uso desses métodos é possível a determinação de estruturas moleculares, frequências vibracionais, espectros eletrônicos, reatividade química, dentre outras propriedades (CRAMER, 2004; MORGON; COUTINHO, 2007; HEAD-GORDON, 1996).

Basicamente, os métodos teóricos que compõem a química computacional são divididos em duas classes principais: os métodos de química quântica e os métodos de mecânica molecular. Os métodos de química quântica são baseados na solução da equação de Schrödinger. Como exemplo de alguns desses métodos, tem-se os chamados métodos *ab initio* ou métodos de primeiros princípios (SZABO; OSTLUND, 1996), os métodos semiempíricos (STEWART, 2007) e os métodos baseados na teoria do funcional de densidade (PARR; WEITAO, 1994), onde, ao invés da função de onda, o objeto de estudo é a densidade eletrônica. Já os métodos de mecânica molecular (MM – Molecular Mechanics) são aqueles que fazem uso de modelos matemáticos contendo a adição de parâmetros empíricos para descrever a energia total e a estrutura molecular de um determinado sistema (RAPPE, 1997). Dentro da classe de métodos baseados na mecânica molecular, estão contidos os métodos de dinâmica molecular (MD – Molecular Dynamics) (RAPAPORT, 2004) e Monte Carlo (MC) (FRENKEL; SMIT, 2002).

A aplicação de métodos da química computacional tem como objetivo principal auxiliar na análise e interpretação de dados obtidos experimentalmente, com a vantagem de fornecer detalhes ao nível atômico/molecular que em muitos casos são cruciais para uma compreensão completa acerca da medida experimental realizada. Isso tem tornado a química computacional um tipo de ferramenta indispensável em diversas áreas da química, física, biologia e ciência dos materiais. Por exemplo, em química, a utilização de métodos baseados na mecânica quântica pode auxiliar a refinar a interpretação de espectros de sistemas moleculares, estruturas químicas, propriedades termodinâmicas, mecanismos de reação, dentre outros. Em biologia molecular, o principal destaque é para o uso dos métodos baseados na mecânica molecular (LESZCZYNSKI, 2003; MADURA, 2016). Nesse contexto, o método de dinâmica molecular tem sido essencial no estudo da dinâmica de proteínas visando uma compreensão sobre a relação estrutura-função desses sistemas. Vale também destacar a aplicação do método de *docking* molecular no estudo da interação de moléculas com sistemas biológicos, onde tem se mostrado uma ferramenta valiosa em estudos envolvendo o desenvolvimento racional de drogas para o tratamento de diversos tipos de doenças. Atualmente, a combinação de métodos de química computacional tem sido usada inclusive para elaboração de vacinas. Em ciências dos materiais, os métodos de química computacional têm sido aplicados principalmente para estudar a reatividade de superfícies sólidas, visando a aplicações em catálise heterogênea (GREELEY, 2016), assim como no estudo acerca da capacidade de materiais porosos de armazenarem gases leves (GOMEZ-GUALDRON *et al.*, 2014). Esses exemplos mostram claramente que a química computacional está definitiva-

mente inserida nos principais temas de fronteira da química moderna, auxiliando em estudos que envolvem diversas questões de problemas práticos da sociedade atual. Infelizmente, os autores não encontraram nem sequer um trabalho voltado a prospecção nesta área para enriquecer a discussão neste trabalho. Dessa forma, o objetivo central deste trabalho é apresentar o atual cenário da produção intelectual envolvendo a aplicação de métodos da química computacional.

## 2 Metodologia

Este estudo apresenta natureza qualitativa e quantitativa, sendo baseado na busca por resultados numéricos de produção, mas também abordando aspectos de agrupamentos de áreas e setores de interesse que envolvem a ciência e a tecnologia desenvolvida na área de química computacional.

A busca dos documentos foi feita através do Portal de Periódicos da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoas de Nível Superior (CAPES), redirecionado a partir do canal Acesso CAFe (Comunidade Acadêmica Federada).

A pesquisa pelas patentes foi realizada nas seguintes bases: Portal de Patentes da América Latina (LATIPAT), Derwent Innovations Index (DERWENT), Escritório Europeu de Patentes (Espacenet), e para a pesquisa de artigos científicos foram consideradas as bases Scielo e Scopus. Foram utilizadas buscas avançadas considerando os campos título e resumo, combinação de termos e/ou expressões desejadas para a pesquisa, e considerando também as variações necessárias em cada base. As palavras-chave descritas no Quadro 1 foram introduzidas nas bases supracitadas usando-se nas buscas os termos em português, espanhol e inglês. A busca por áreas tecnológicas foi realizada na base Patent Inspiration, que permitiu criar um gráfico de colmeia e elaborar uma linha de tempo (busca realizada em título, *abstract* e palavras-chave).

**Quadro 1** – Palavras-chave e cruzamentos realizados nas pesquisas executadas nas bases investigadas

NÚMERO DA BUSCA	PORTUGUÊS	INGLÊS	ESPAÑHOL
1	“Computacional”	“Computational”	“Computacional”
2	“Química Computacional”	“Computational Chemistry”	“Química Computacional”
3	“Modelagem Computacional”	“Computational Modeling”	“Modelado Computacional”
4	“Catalise Computacional”	“Computational Catalysis”	“Catálisis Computacional”
5	“Biocatalise Computacional”	“Computational Biocatalysis”	“Biocatálisis Computacional”

Fonte: Elaborado pelos autores deste artigo (2018)

## 3 Resultados e Discussão

No Quadro 2 está apresentado um resumo dos resultados quantitativos gerados a partir das buscas pelas palavras-chave. Os resultados das buscas nos idiomas português (PT) e espanhol (ES) foram dispostos juntos na mesma coluna devido aos termos “Computacional” e “Química

Computacional” serem escritos idênticos em ambas as línguas e algumas bases utilizadas não apresentarem filtros de buscas de linguagem.

**Quadro 2** – Recuperações de patentes e artigos científicos realizados com base nas palavras-chave do Quadro 1. Pesquisa realizada em junho de 2018

PALAVRAS- -CHAVE	LATIPAT		DERWENT		SCIELO		SCOPUS		ESPACENET	
	PT/ES	EN	PT/ES	EN	PT/ES	EN	PT/ES	EN	PT/ES	EN
1	695	3	0	31.603	1.377	1.083	437	1.034.707	1	10.000
2	0	0	0	55	13	17	7	7.913	0	19
3	2	0	0	57	52	32	22	19.180	0	35
4	0	0	0	0	0	0	0	59	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0

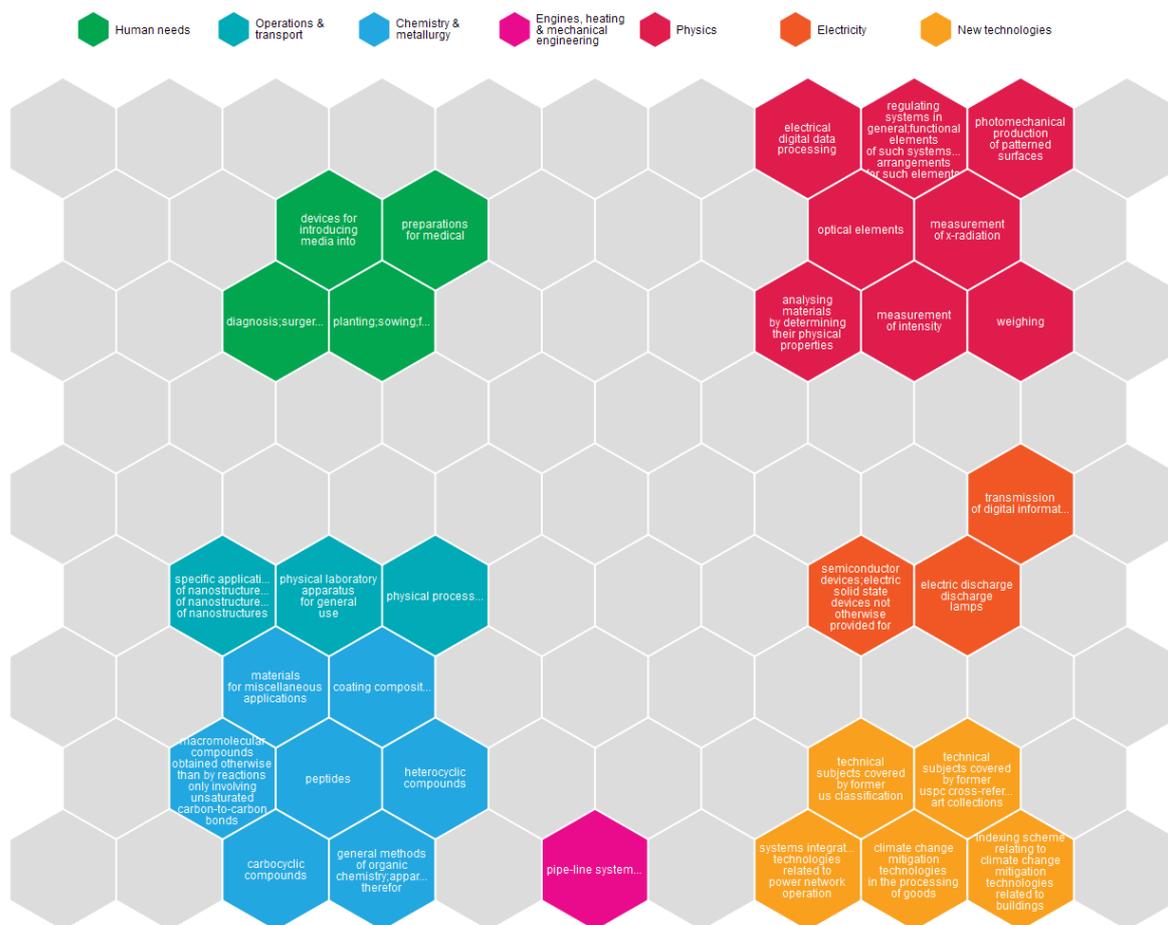
Fonte: Elaborado pelos autores deste artigo (2018)

Para as buscas nas bases patentárias para a palavra-chave 1, foram obtidos valores distintos entre a quantidade de patentes em inglês, com destaque para a DERWENT, que apresentou o maior número de patentes (31.603). Já para os resultados em português/espanhol, no LATIPAT encontraram-se 695 patentes. Apesar de números distintos, a proporção é natural e relacionada com os contingentes absolutos de produção patentária em cada base, considerados os principais países de prioridade. Em relação aos registros nas bases de produção científica, observa-se o registro de publicações na base Scopus da ordem de mil vezes superior a da base Scielo. Tal resultado induz à conjectura de que a maior parte dos trabalhos relevantes é publicada em língua inglesa em revistas de alto impacto, signatárias daquela base de dados. As baixas recuperações para o termo “Computational Chemistry” foram inesperadas, pois os autores esperavam maiores números de documentos devido à química computacional apresentar uma vasta aplicabilidade em pesquisas científicas e tecnológicas. As bases de patentes DERWENT e Espacenet apresentaram juntas apenas 92 patentes em inglês, enquanto que para português/espanhol não foi obtido nenhum documento. Isto pode ser um reflexo da falta de conhecimento, interesse e/ou estímulo de químicos teóricos em atuar na área de propriedade intelectual. Os números também são considerados baixos para as buscas nas bases de produções científicas, totalizando menos de 8.000 documentos nos três idiomas e nas bases Scielo e Scopus juntas. Para a busca na base Scopus da palavra-chave “Computational Modeling”, os registros recuperados foram em maior quantidade quando comparados com os últimos números apresentados, mais de 19.180, isto porque esse termo abrange mais áreas de pesquisa que a Química Computacional, mas não apresentou diferença significativa na quantidade de patentes considerando-se a busca na base DERWENT. Os resultados para as buscas dos termos “Computational Catalysis” e “Computational Biocatalysis” em todas as bases descritas na tabela foram extremamente negativos, chegando a não ter registros. A catálise e biocatálise química recebem muita atenção não apenas no meio científico, mas também de empresas privadas, por ter um papel fundamental no melhoramento da eficiência e seletividade na síntese de diversos produtos químicos. Foram considerados para os próximos resultados apenas as bases DERWENT e Scopus, por apresentarem maior núme-

ro de registros, e as palavras-chave “Computational Chemistry”, por ser o termo de principal interesse deste trabalho.

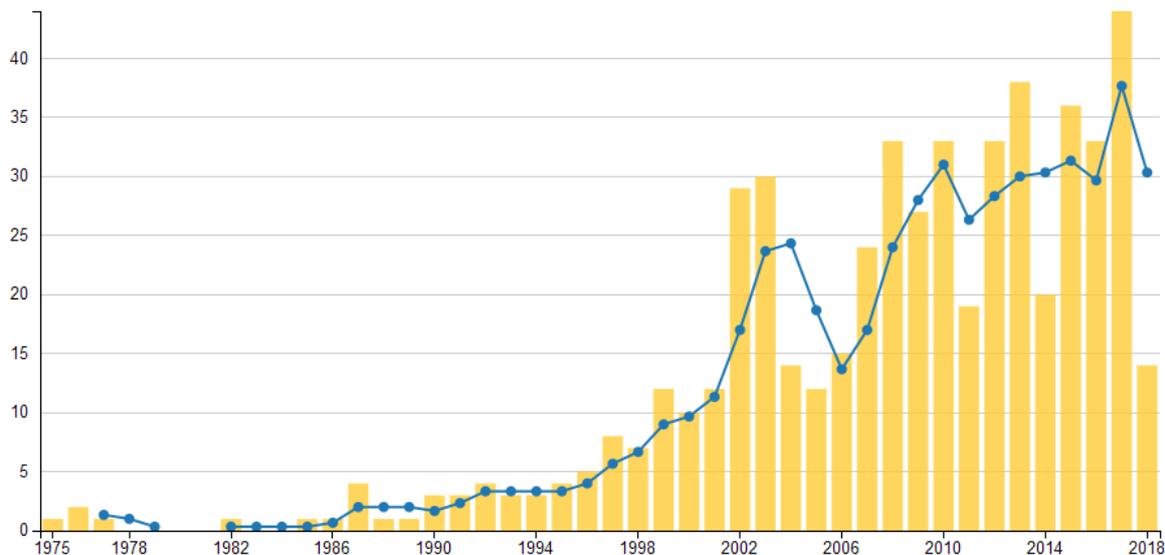
A base Patent Inspiration foi utilizada para relacionar as áreas tecnológicas vinculadas ao verbete “Computational Chemistry”. A recuperação de 541 depósitos permitiu a visualização de seis grandes grupos de domínio tecnológico, conforme visto na Figura 1. Um dos domínios é relacionado à área de saúde, destacando-se 23 depósitos em planejamento de medicamentos e 24 depósitos em diagnóstico. No grande domínio da Física, destacam-se processamento elétrico e digital (71 depósitos) e análise de propriedades físicas de materiais (51 recuperações). Já nos domínios da Química e Operações e Transporte destacam-se as aplicações na área de nanopartículas (15 depósitos) e análises físicas de processos (40 depósitos). Na área de Elétrica, destacam-se os depósitos na área de semicondutores (15) enquanto em Mecânica a maior incidência é em “pipe-lines system” (5). Já para os domínios das novas tecnologias, destacam-se os relacionados às mudanças climáticas (14). Na Figura 2 está apresentada a linha de tempo de patentes referente a mesma busca. É possível observar um crescimento nos números de patentes, desde a primeira em 1975 até o presente momento, sendo o maior pico registrado em 2017, com 44 patentes.

**Figura 1** – Colmeia de domínios tecnológicos relacionados à “Computational Chemistry”. Figura elaborada na base Patent Inspiration a partir de 541 recuperações. Pesquisa realizada em agosto de 2018



Fonte: Patent Inspiration (2018)

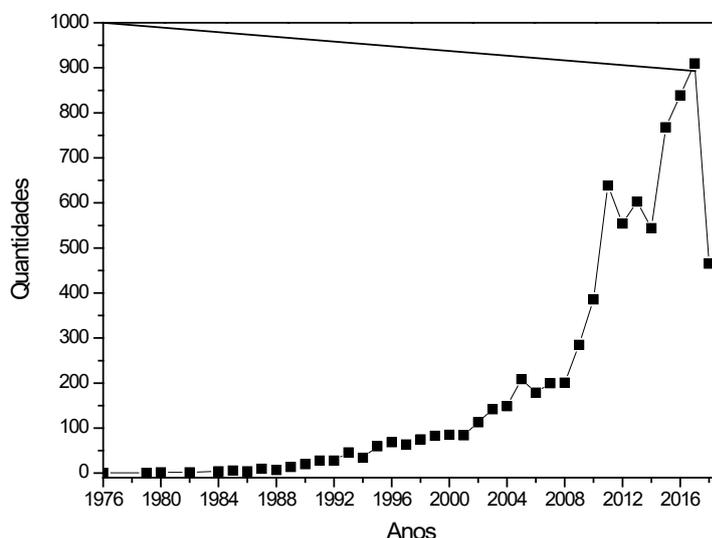
**Figura 2** – Linha de tempo de prioridade obtida a partir do verbete “Computational Chemistry”. Figura elaborada na base Patent Inspiration a partir de 541 recuperações. Pesquisa realizada em agosto de 2018



Fonte: Patent Inspiration (2018)

A Figura 3 apresenta a relação de produção científica na base Scopus ao longo do tempo. A primeira publicação é datada em 1976. Observa-se um aumento gradativo na quantidade de documentos até a primeira década dos anos 2000. A partir de 2010, é possível observar um aumento expressivo nestes números, onde houve o maior pico de produção científica em 2016/2017. O crescimento da produção científica e também de depósitos de patentes (ver Figura 2) acompanhou o desenvolvimento de microprocessadores, que permitiu o desenvolvimento de melhores métodos teóricos e melhores algoritmos. Considerando-se que se está em meados de 2018, a quantidade de artigos publicados já alcançou a metade da produção em relação ao ano anterior.

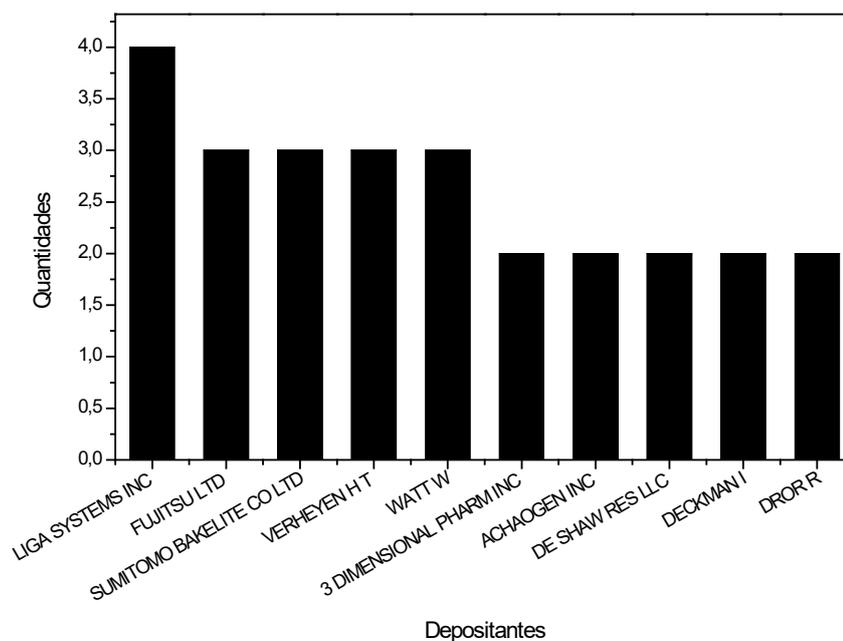
**Figura 3** – Linha do tempo da distribuição de artigos publicados no Scopus para a busca “Computational Chemistry”. Pesquisa realizada em junho de 2018



Fonte: Elaborada pelos autores deste artigo (2018)

A Figura 4 apresenta quais são as 10 principais instituições com patentes na base DERWENT. A partir do gráfico é possível observar uma distribuição heterogênea da detenção de patentes entre as empresas, não apresentando destaque entre elas. Após uma pesquisa sobre estes depositantes, observa-se que a maioria destas empresas tem base no Estados Unidos da América (LIGA SYSTEMS INC, 3-DIMENSIONAL PHARM INC, ACHAOGEN INC e DE SHAW RES LLC), seguida por companhias japonesas (FUJITSU LTD e Sumitomo Bakelite Company Limited). Somente com estas informações não é possível afirmar que os EUA sejam o país com maior número de patentes em Química Computacional, mas apenas apontar que há uma tendência para isso. Estas instituições atuam em diferentes seguimentos científicos e tecnológicos incluindo: desenvolvimento de *softwares* para sistemas operacionais, tecnologia da informação (TI), bioquímica computacional, fabricação de produtos químicos e fármacos. Os outros depositantes não citados são pesquisadores que detêm patentes em parceria com alguma destas empresas.

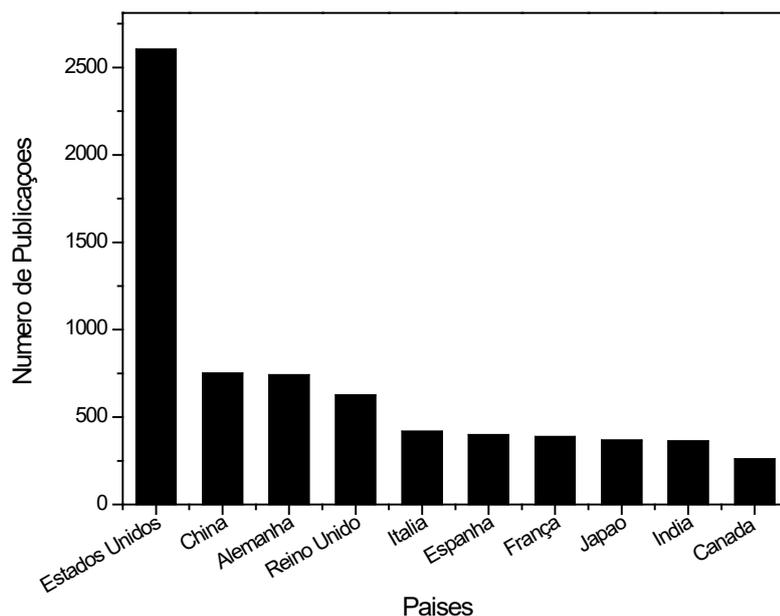
**Figura 4** – As dez instituições detentoras do maior número de patentes na base DEWERT para as palavras-chave “Computational Chemistry”. Pesquisa realizada em junho de 2018



Fonte: Elaborada pelos autores deste artigo (2018)

A Figura 5 é referente aos dez países com maior número de registros científicos na base Scopus. Os Estados Unidos recebem o único destaque aqui, possuindo cerca de 37,00% do total de publicações. Isto corrobora com a provável liderança desse país também na detenção de patentes comentada anteriormente (Figura 4). Porém, observa-se que o Japão não segue esta tendência, caindo da vice-liderança em patentes para a oitava posição em quantidade de artigos científicos. Este fato também sugere que o Japão é um país de forte perfil tecnológico e por isso deve possuir uma política de proteção intelectual, mesmo numa área como a química computacional, que é, historicamente, uma área de natureza acadêmica. Vale salientar que de modo geral, os resultados apresentados na Figura 5 corroboram com as hipóteses levantadas na discussão do Quadro 2, em relação à falta de direcionamento dos pesquisadores químicos teóricos e computacionais para a área de propriedade intelectual.

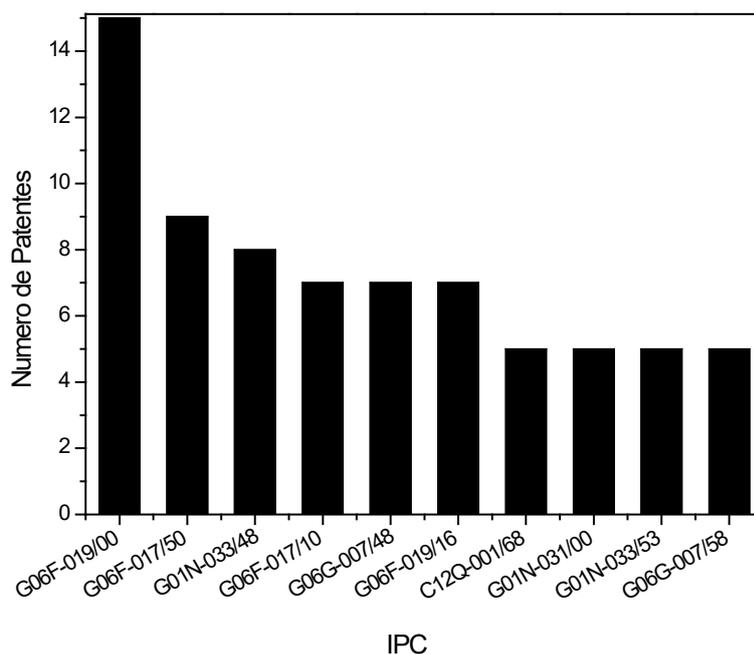
**Figura 5** – Os 10 principais países em pesquisas científicas na base Scopus com o termo “Computational Chemistry”. Pesquisa realizada em junho de 2018



Fonte: Elaborada pelos autores deste artigo (2018)

A Figura 6 apresenta a distribuição das patentes obtidas a partir da base DERWENT, de acordo com o Código Internacional de Patentes (IPC). Como pode ser visto no gráfico, cerca de 69,00% das classificações das 55 patentes recuperadas (Quadro 2) correspondem ao código G06F, o qual está relacionado com processamento elétrico de dados. Já os outros códigos (G01N, G06G e C12Q) correspondem a cerca de 30,00 %, 21,00 % e 9,00 % das classificações, respectivamente.

**Figura 6** – Gráfico das 10 classificações IPC mais comuns para as patentes recuperadas na base DERWENT utilizando as palavras-chave “Computational Chemistry”. Pesquisa realizada em junho de 2018



Fonte: Elaborada pelos autores deste artigo (2018)

No Quadro 3, os códigos IPCs apresentados no gráfico anterior estão relacionados às suas respectivas classes e subclasses. Os códigos destacados são pertencentes a diferentes áreas de aplicações, o que dá uma visão mais ampla da utilização que os depositantes têm feito da Química Computacional para diversas finalidades. De modo geral, os dados sumarizados no Quadro 3 conferem o caráter multidisciplinar da química computacional, haja vista o registro de patentes em classes envolvendo estudos em química, bioquímica, enzimologia e desenvolvimento de códigos computacionais para aplicações diversas. Este é um ponto importante para reforçar o considerável potencial desta área para estudos voltados à geração de produtos tecnológicos importantes para setores estratégicos da sociedade moderna.

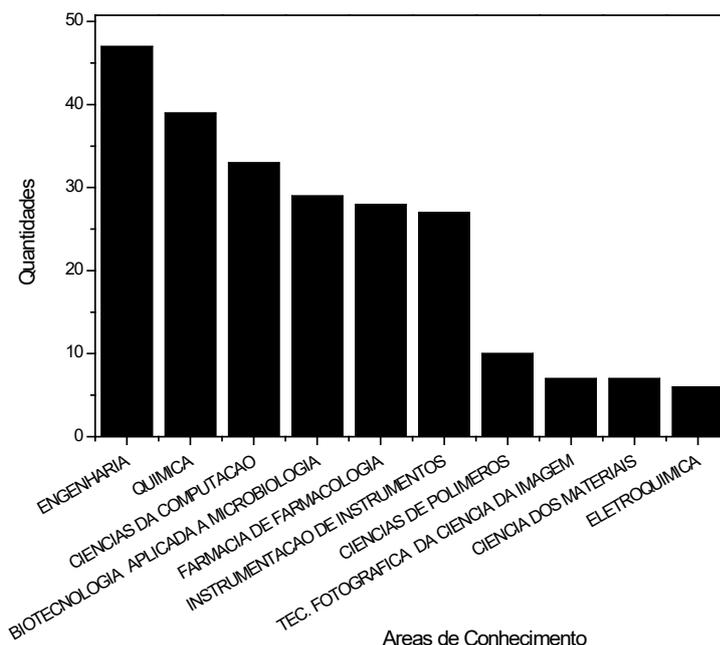
**Quadro 3** – Classificação dos IPCs dentro de classes e subclasses, de acordo com o Instituto Nacional da Propriedade Intelectual (INPI)

CÓDIGO IPC	CLASSES	SUBCLASSES
G06F (G06F-019/00, G06F-017/50, G06F-017/10, G06F-019/16)	Instrumentos: Cômputo; Cálculo; Contagem.	Processamento elétrico de dados digitais
G01N (G01N-033/48, G01N-031/00, G01N-033-53)	Instrumento: Medição; Teste.	Investigação ou análise dos materiais pela determinação de suas propriedades químicas ou físicas
G06G (G06G-007/48, G06G-007/58)	Instrumentos: Cômputo; Cálculo; Contagem.	Computadores analógicos
C12Q (C12Q-001/68)	Química: Bioquímica; Microbiologia; Enzimologia.	Processos de medição ou ensaio envolvendo enzimas, ácidos nucleicos ou microorganismos.

Fonte: Elaborado pelos autores deste artigo (2018)

Na Figura 7 são mostradas as áreas de conhecimento com maiores registros de patentes. Este gráfico mostra que há semelhanças entre o desenvolvimento científico e o tecnológico que utilizam a Química Computacional como ferramenta. Na introdução deste trabalho foram abordadas algumas das áreas que fazem uso dessa ferramenta para estudos científicos e, através do gráfico abaixo, observa-se que o mesmo ocorre nas pesquisas e desenvolvimento de propriedade intelectual. Para a busca executada na base DERWENT, os resultados mostraram que as principais áreas de conhecimento que têm aplicado tal ferramenta em documentos patenteados são Engenharia e Química, abrangendo, respectivamente, 85,46% e 70,91% das áreas descritas nos documentos.

**Figura 7** – As 10 Áreas de Conhecimento com maiores registros na pesquisa da base DERWENT com o termo “Computational Chemistry”. Pesquisa realizada em junho de 2018



Fonte: Elaborada pelos autores deste artigo (2018)

## 4 Considerações Finais

Através do estudo realizado nas bases patentárias e de referências científicas na área de Química Computacional, foi possível observar um aumento gradativo da produção científica ao longo dos últimos 40 anos e um lento crescimento no desenvolvimento tecnológico, mesmo podendo ser utilizada em diversos produtos e serviços. Uma justificativa para isso pode ser dada devido à maioria dos pesquisadores desta área se encontrarem em universidades (que geralmente têm como principal interesse o desenvolvimento de ciência básica e divulgação de seus resultados através de artigos científicos) e poucos estarem em laboratórios de instituições privadas, que são as principais detentoras de patentes. Nenhuma universidade se encontrou entre as 10 principais depositárias de patentes, sendo este *ranking* composto apenas por empresas. Os EUA é o país com o maior número de documentos científicos e, provavelmente, de patentes nas bases DERWENT e Scopus referentes ao termo “Computational Chemistry”, enquanto o Brasil não se encontra entre os dez principais. A quantidade de arquivos recuperados para este último termo nas cinco bases utilizadas foi uma surpresa negativa, pois eram esperado números maiores. Acredita-se que, de modo geral, este trabalho trouxe uma ideia do cenário científico e tecnológico atual envolvendo a área da química conhecida como Química Computacional. Em síntese, os resultados apresentados neste trabalho mostraram que a atuação da química computacional no campo da propriedade intelectual ainda é consideravelmente modesta, o que, na nossa opinião, pode ser visto como uma boa oportunidade a ser explorada num trabalho conjunto com diversas áreas do conhecimento, já que apresenta espaço para o desenvolvimento de novos algoritmos e códigos computacionais, para estudos em catálise química, desenvolvimento de fármacos, elucidação estrutural de sistemas biológicos complexos, dentre outros.

## Referências

- CRAMER, C. J. **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**. 2. ed. [S.I]: John Wiley & Sons, 2004.
- FRENKEL, D.; SMIT, B. **Understanding Molecular Simulation: From Algorithms To Applications**. 2. ed. [S.I]: Academic Press, 2002.
- GOMEZ-GUALDRON, D. A. *et al.* Computational Design of Metal-Organic Frameworks Based on Stable Zirconium Building Units for Storage and Delivery of Methane. **Chem. Mater.** v. 26, n. 19, p. 5.632-5.639, 2014.
- GREELEY, J. Theoretical Heterogeneous Catalysis: Scaling Relationships and Computational Catalyst Design. **Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.**, v. 7, p. 605-635, 2016.
- HEAD-GORDON, M. Quantum Chemistry and Molecular Processes. **J. Phys. Chem.**, v. 100, n. 31, p. 13.213-13.225, 1996.
- LESZCZYNSKI, J. **Computational Chemistry: Reviews of Current Trends**. [S.I]: World Scientific, 2003. v.8.
- LÓPEZ-CAMACHO, C. *et al.* Rational Zika Vaccine Design Via The Modulation Of Antigen Membrane Anchors In Chimpanzee Adenoviral Vectors. **Nature Communications**, v. 9, p. 2.441, 2018.
- MADURA, J. D.; UL-HAQ, Z. **Frontiers in Computational Chemistry**. [S.I]: Bentham Science, 2016. v. 1.
- MORGON, N. H.; COUTINHO, Kaline. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. São Paulo: Livraria da Física, 2007.
- PARR, R. G.; WEITAO, Y. **Density-Functional Theory of Atoms and Molecules**. New York: Oxford University Press, 1994.
- RAPAPORT, D. C. **The Art of Molecular Dynamics Simulation**. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- RAPPÉ, A. K.; CASEWIT, C. J. **Molecular Mechanics Across Chemistry**. New York: University Science Books, 1997.
- STEWART, J. J. P. **In Reviews in Computational Chemistry**. [S.I]: John Wiley & Sons, 2007. 45 p. v. 1.
- SZABO, A.; OSTLUND, N. S. **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**. [S.I]: Dover Publications, 1996.

## Sobre os autores

### **Eric José Braga Ferreira**

*E-mail:* eric\_braga\_@hotmail.com

Graduando em Química Tecnológica e Industrial (Bacharel), pela Universidade Federal de Alagoas.

Endereço profissional: Av. Lourival Melo Mota, S/N, Instituto de Química e Biotecnologia - Laboratório de Eletroquímica Aplicada - Universidade Federal de Alagoas - Campus A.C. Simões, Tabuleiro dos Martins, Maceió, Alagoas, 57072-900.

### **Pedro Vitor Dos Santos**

*E-mail:* vitor.pedro96@hotmail.com

Graduando em Química Tecnológica e Industrial (Bacharel), pela Universidade Federal de Alagoas.

Endereço profissional: Av. Lourival Melo Mota, S/N, Instituto de Química e Biotecnologia - Laboratório de Eletroquímica Aplicada - Universidade Federal de Alagoas - Campus A.C. Simões, Tabuleiro dos Martins, Maceió, Alagoas, 57072-900

### **Júlio Cosme Santos Da Silva**

*E-mail:* juliocsdasilva@gmail.com

Graduado em Química Bacharelado, pela Universidade Federal de Pernambuco (2007). Mestre em Química, pela Universidade Federal de Minas Gerais (2009). Doutor em Química, pela Universidade Federal de Minas Gerais (2013).

Endereço profissional: Av. Lourival Melo Mota, S/N, Instituto de Química e Biotecnologia - Laboratório de Eletroquímica Aplicada - Universidade Federal de Alagoas - Campus A.C. Simões, Tabuleiro dos Martins, Maceió, Alagoas, 57072-900.

### **Josealdo Tonholo**

*E-mail:* tonholo@gmail.com

Bacharel e Licenciado em Química, pela Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto (1988). Mestre (1991) e Doutor (1997) em Físico-Química, pelo Instituto de Química de São Carlos, da Universidade de São Paulo (USP).

Endereço profissional: Av. Lourival Melo Mota, S/N, Instituto de Química e Biotecnologia - Laboratório de Eletroquímica Aplicada - Universidade Federal de Alagoas - Campus A.C. Simões, Tabuleiro dos Martins, Maceió, Alagoas, 57072-900.