O fim da Teoria de um Prémio Nobel da Química?

A conhecida teoria de Marcus, teoria que explica a transferência de eletrões em reações químicas, foi invalidada por uma equipa de cientistas da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra (FCTUC), liderada pelo professor catedrático Luís Arnaut.

Sem margem para dúvidas, o artigo científico acabado de publicar na conceituada *Nature Communications* (https://www.nature.com/articles/s41467-018-05267-5)*,* do grupo *Nature,* prova que a teoria desenvolvida em 1956 por Rudolph Arthur Marcus, e que lhe valeu a atribuição do prémio Nobel da Química em 1992, está errada.

Em causa está a reorganização de moléculas necessária para a transferência de eletrões. Para ocorrer este tipo de reações químicas, a teoria de Marcus prevê que essa reorganização tem de ser principalmente efetuada nos solventes, mas o estudo agora publicado diz que não é assim, evidenciando que a chave para a transferência de eletrões está nos reagentes.

Esta descoberta é o culminar de duas décadas e meia de estudos desenvolvidos no Departamento de Química da FCTUC, que geraram muita controvérsia dentro da comunidade científica ao longo do percurso. O grande impulsionador de toda esta investigação foi o químico Formosinho Simões (catedrático da FCTUC, falecido em dezembro de 2016), que sempre questionou a teoria de Marcus.

«O Doutor Formosinho Simões defendia que a chave para transferência de eletrões estava nos reagentes, mas faltava uma evidência experimental decisiva para refutar a teoria de Marcus, pois Marcus era um cientista muito credível e a sua teoria foi premiada com o prémio Nobel da Química 1992», conta Luís Arnaut.

Confrontado com duas visões radicalmente opostas em relação a esta reação química, «em 1993 reuni os químicos mais eminentes do mundo num NATO Workshop em Portugal para discutir o problema. À exceção de Formosinho Simões, ninguém ousou questionar o prémio Nobel. Foi uma discussão muito intensa», recorda o docente da FCTUC.

No entanto, o grupo de Coimbra não esmoreceu e avançou sozinho na conceção de experiências que permitissem determinar qual das duas teorias estava correta. Foram necessários 25 anos: «foi uma tarefa extremamente difícil. Tivemos de desenhar, conceber e executar um vasto conjunto de estudos e experiências. Há múltiplas razões que justificam tantos anos de estudo, entre as quais a exigência de equipamento altamente sofisticado que nós não possuíamos, a necessidade de sintetizar moléculas que não existiam e a contratação de pessoal altamente qualificado para desenvolver o trabalho» sublinha Luís Arnaut.

Além de todas estas dificuldades, os cientistas da FCTUC tiveram de enfrentar a crítica da comunidade científica, que teimava em não aceitar que um Nobel da Química pudesse estar errado. Após um longo e sinuoso caminho, finalmente, em 2014, a equipa de Formosinho Simões e Luís Arnaut reuniu as condições adequadas para realizar «a experiência decisiva. Os resultados ficaram completos no final do ano passado (2017). Submetemos o artigo científico ao grupo Nature e, mais uma vez, a polémica foi inevitável», relata o coordenador do estudo.

No entanto, a argumentação dos cientistas da FCTUC convenceu os *reviewers* da revista e o artigo foi publicado esta quarta-feira (25 de julho de 2018). Questionado sobre qual será a reação da comunidade científica, Luís Arnaut acredita que «talvez vá ficar perplexa porque o que está escrito no artigo vai contra a corrente. Expõe claramente que a teoria de Marcus não funciona.»

Quanto a implicações práticas desta nova teoria – denominada de “modelo de interseção de estados” –, o catedrático comenta: «não creio que de repente a teoria desenvolvida em Coimbra permita originar um produto que chegue ao mercado com vantagens relativamente aos existentes. Demorámos 25 anos a realizar esta experiência, por isso é expectável que demore muitos anos para se desenvolver sistemas de uma forma diferente. Porém o nosso modelo pode inspirar melhores soluções em áreas onde a transferência de eletrões é importante».

As reações de transferência de eletrão são a base das reações de oxidação-redução, e ocorrem em sistemas biológicos como a fotossíntese e a respiração, bem como em sistemas artificiais, por exemplo, painéis solares, polímeros condutores utilizados em televisões e computadores, optoelectrónica, etc.

Cristina Pinto (Assessora de Imprensa - Universidade de Coimbra)

Ciência na Imprensa Regional – Ciência Viva