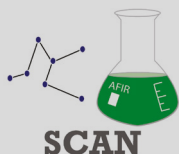
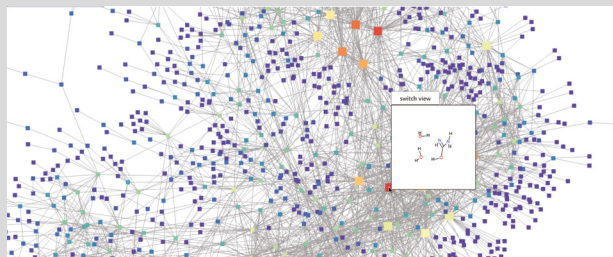


Desvendar Reações com o SCAN



Uma reação química pode ser um processo complexo, envolvendo um número elevado de intermediários, e a sua total compreensão implica saber como os produtos são formados a partir dos reagentes. Isto significa que uma reação química pode ser tratada como uma rede complexa que consiste em numerosas interações moleculares. O *Searching Chemical Action and Network*, SCAN, é proposto como um ambiente alternativo para a compreensão de redes complexas de caminhos de reação, fornecendo a capacidade de desvendar os detalhes das reações químicas. A interface gráfica é amigável, e os utilizadores podem aceder, visualizar e analisar a rede de vias possíveis para uma dada reação (M. Kuwahara *et al. Digit. Discov.* **2023**, 2, 1104–1111. DOI: 10.1039/D3DD00026E). Atualmente, não há opção para os utilizadores fazerem o *upload* de redes pessoais de reações químicas, mas podem carregar, visualizar e analisar mapas de dados pré-carregados fornecido ao SCAN por uma equipa de



Exemplo de um mapa de uma reação química. @SCAN.

dados independente. Os dados escolhidos e fornecidos pela equipa são uma coleção de dados AFIR (*Artificial Force Induced Reaction*), que são gerados por um grupo de investigação liderado pelo Prof. Satoshi Maeda da Universidade de Hokkaido, no Japão. O código-fonte SCAN está disponível no *GitHub*.

Veja mais em scan.sci.hokudai.ac.jp

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt



Libertação de dióxido de carbono da casca do ovo. @BeautifulChemistry.

Veja mais em beautifulchemistry.net

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

A Química é Linda!

O site *BeautifulChemistry.net* começou como uma colaboração entre a *University of Science and Technology of China* (USTC) e a *Tsinghua University Press* (TUP). O objetivo deste projeto é mostrar a beleza da química ao público em geral. A primeira versão do site foi lançada em 2014. Nesta versão, os autores usaram uma câmara 4K UltraHD e lentes macro para capturar reações químicas com detalhes surpreendentes sem a distração do material de vidro. A versão atual contém várias secções. A secção “História” resulta de uma pesquisa cuidadosa sobre referências históricas, e mostra renderizações CG fotorrealistas para reproduzir alguns dos instrumentos químicos mais importantes. Na secção “Estrutura” são incluídas estruturas químicas com uma nova aparência, e na secção “Reação” podemos encontrar diversos vídeos sobre reações químicas. A química que “nos rodeia”, como nunca a vimos!