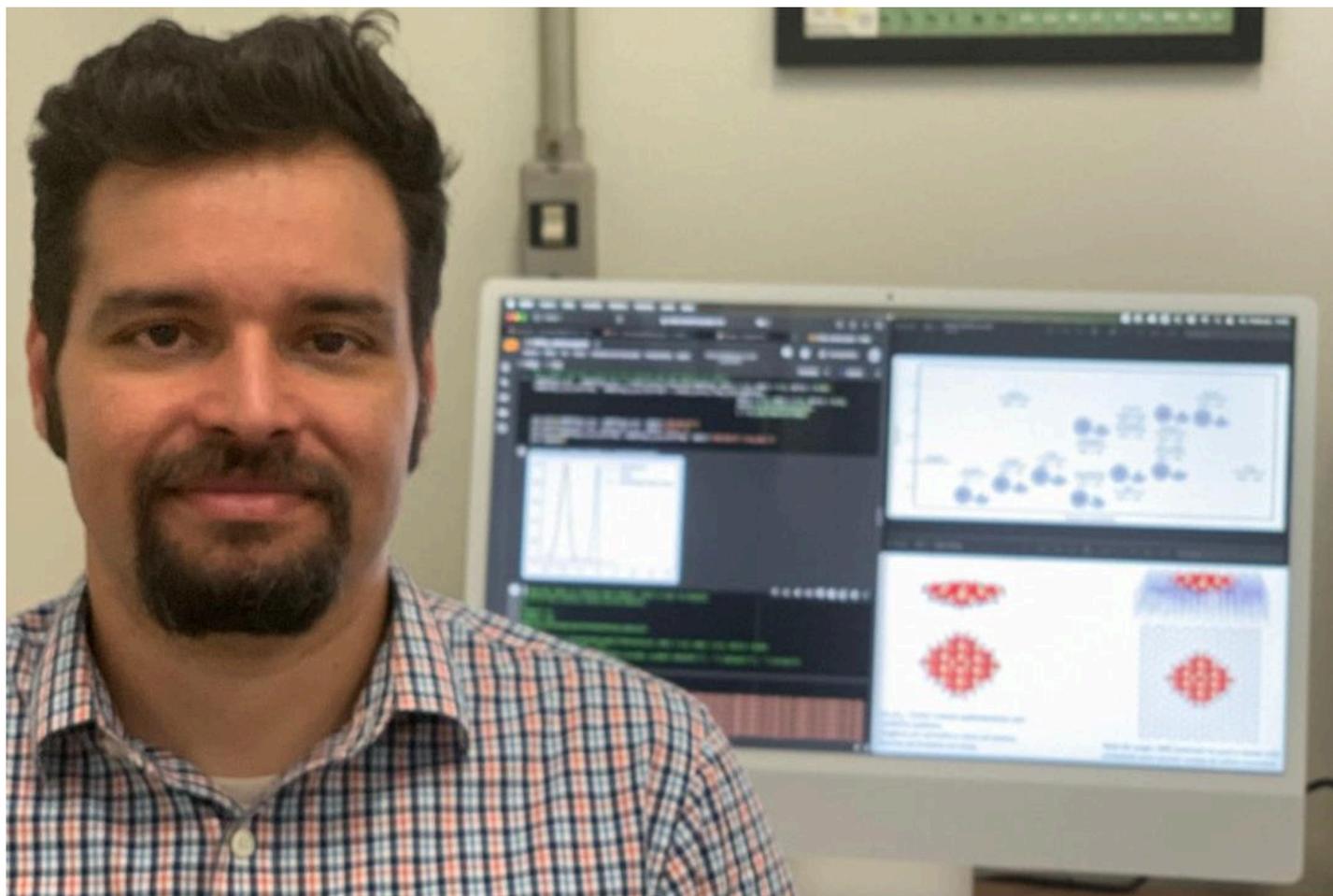


Novo professor do IQSC aposta na química computacional para inovar em soluções para transição energética

Antonio Gustavo Sampaio de Oliveira Filho lidera o Grupo de Espectroscopia e Cinética Computacional no Instituto e une os conhecimentos químicos para desenvolver soluções que podem transformar o mundo



O professor Antonio Gustavo Sampaio de Oliveira Filho emprega a química quântica computacional para descobrir novos caminhos que solucionem desafios modernos como a transição energética | Foto: Arquivo pessoal

A busca por fontes de energia limpas e renováveis se torna cada vez mais urgente, especialmente em um mundo no qual cerca de 86% das emissões de dióxido de carbono (CO₂) provêm da queima de combustíveis fósseis, segundo o [Global Carbon Project \(GCP\)](#). Esse cenário intensifica o debate sobre a transição energética, que aborda não só o investimento em novas tecnologias, mas também os complexos desafios de custo e viabilidade associados a elas. Muitas vezes, uma nova tecnologia que promete eficiência, como a energia nuclear, pode gerar outros problemas, a exemplo da produção de resíduos tóxicos.

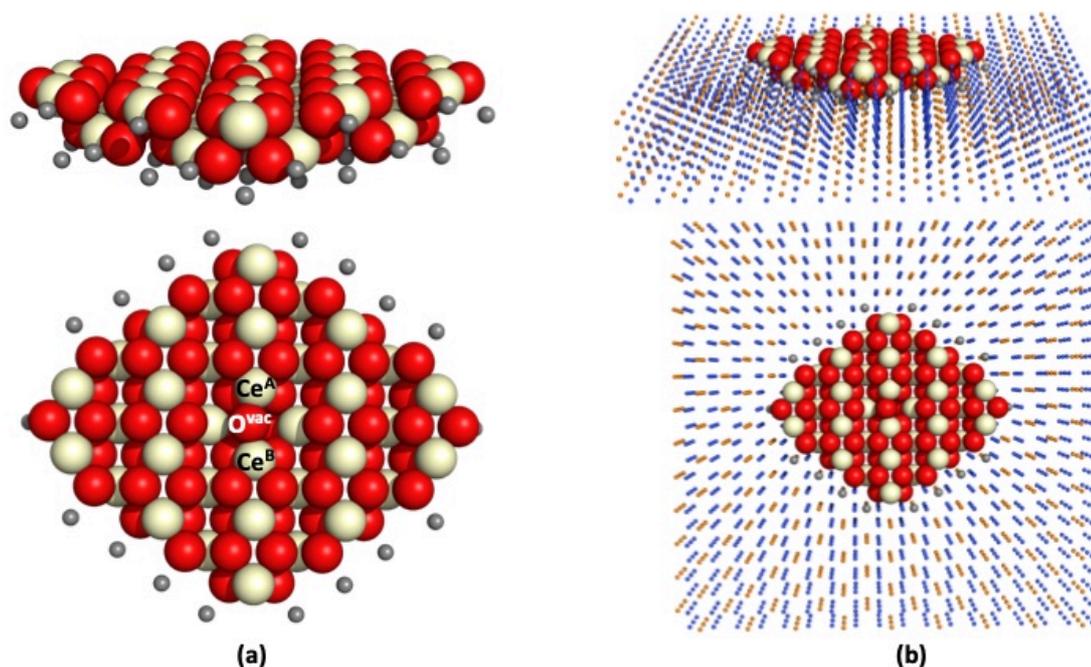
À frente de pesquisas promissoras que oferecem novas perspectivas para enfrentar esses desafios está o professor [Antonio Gustavo Sampaio de Oliveira Filho](#), do Instituto de Química de São Carlos (IQSC) da USP. Com formação em Química pela própria Universidade e um pós-doutorado na [Universidade de Emory](#), nos Estados Unidos, o docente se dedica a pesquisas fundamentais para a geração de

hidrogênio e a captura de dióxido de carbono da atmosfera, essenciais para a mitigação dos impactos das mudanças climáticas.

Para investigar o assunto, o professor coordena o Grupo de Espectroscopia e Cinética Computacional no IQSC. O grupo realiza pesquisas em três vertentes: espectroscopia, estudo da interação de moléculas com a luz; cinética, estudo da velocidade e mecanismo das reações químicas; e desenvolvimento de ferramentas e métodos computacionais para investigar a química.

Soluções verdes – Segundo o docente, um dos grandes diferenciais de suas pesquisas é a utilização da química computacional, que permite explorar diferentes sistemas e processos químicos sem produção de resíduos. Dentre suas pesquisas, o professor investiga o uso de metais abundantes na natureza, como ferro, cobalto e níquel, como catalisadores na produção de hidrogênio (H₂), um combustível que se destaca por não emitir gases de efeito estufa. “A gente se inspira na literatura científica e na natureza para encontrar diferentes sistemas químicos que promovam processos do nosso interesse, moléculas energéticas, captura de CO₂, de acordo com esses critérios: eficiência, abundância e potencialmente menor toxicidade”, explica o docente do Departamento de Físico-Química do IQSC.

Esse tema faz parte do projeto de doutorado do estudante Renan Ribeiro Bertoloni, no qual a química computacional também atua permitindo que um número maior de estruturas sejam estudadas com menos recursos. Por meio de cálculos, o computador seleciona aquelas reações que apresentam o maior potencial energético. “Seja para redução de CO₂ ou para qualquer outro processo, o grande desafio é descobrir os catalisadores que fazem isso de maneira eficiente”, afirma o professor ao comemorar a maior assertividade e redução de custos dos processos envolvendo materiais alternativos e mais abundantes.



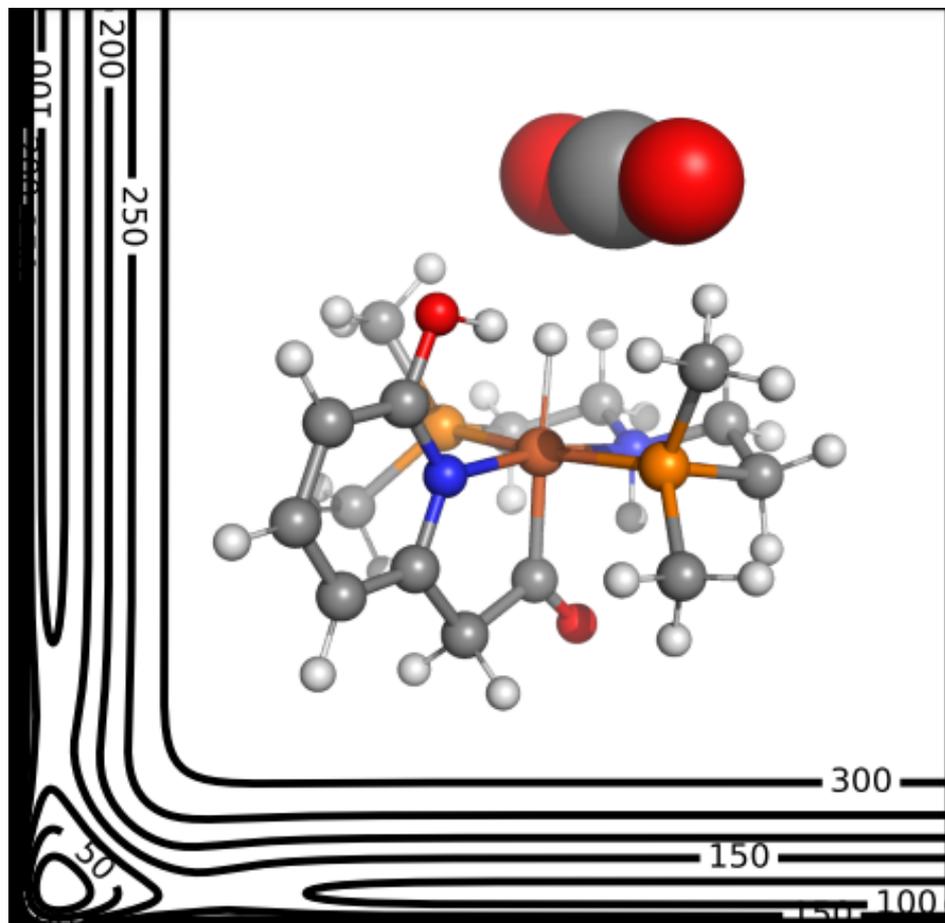
Esse é um modelo computacional de um material estudado que avalia como aumentar a capacidade de baterias lítio-enxofre | Imagem: Reprodução

A interação das moléculas com a luz – Outra frente promissora de suas pesquisas é sua expertise em combinar espectroscopia molecular e cinética química, estudando como a luz interage com a matéria e as transformações resultantes dessa interação. Oliveira Filho explica que manipular átomos e moléculas com luz é uma abordagem que abre novas fronteiras para o desenvolvimento desde fotocatalisadores a computadores quânticos e outras aplicações científicas.

Vania Martins Ramos, orientada no mestrado pelo professor em 2021 e uma das atuais colaboradoras do grupo, está investigando o uso de fotossensibilizadores baseados em manganês, ferro e cobre como alternativas promissoras para captura e conversão da luz solar em energia química, importante em

diferentes cenários, como fotossíntese artificial, produção de combustíveis renováveis e armazenamento de energia. “Moléculas guardam energia de jeitos diferentes. São três estados possíveis: eletrônico, vibracional e rotacional. A ideia é entender como manipular cada uma de forma controlada”, detalha o professor.

A união da computação e da química possibilita que o professor e seu grupo analisem um maior número de estruturas químicas com maior agilidade, economizando recursos e tempo no processo de descoberta. “Cálculos da química computacional são uma ferramenta crucial para entender a geometria e a estrutura eletrônica dos complexos metálicos, permitindo propor alterações que visem melhorias práticas”, explica Antonio.



Representação da reação entre o CO₂ e um catalisador de ferro |
Imagem: Reprodução

Eficiência e escalonamento – Seja na criação de novos materiais ou na otimização de processos químicos utilizando luz, as pesquisas desenvolvidas por Antonio têm em comum a busca por eficiência. “Entender os processos é uma coisa, fazer em escala é outra, fazer economicamente viável e atrativo e encontrar um ambiente político favorável à mudança é outro problema ainda”, comenta Antonio ao mencionar os desafios de suas pesquisas.

Enquanto tentava desvendar detalhes sobre a interação de moléculas químicas que poderiam resolver esses impasses, o professor realizou uma das que considera suas maiores conquistas até o momento. Em 2017, o docente estudou o desempenho dos diferentes modelos computacionais usados para estudar moléculas na pesquisa *How To Arrive at Accurate Benchmark Values for Transition Metal Compounds: Computation or Experiment?*. Como cada modelo tem custos e precisões diferentes, Antonio desenvolveu um método que aponta qual deles é o melhor para o seu projeto. “O que queremos fazer é reduzir a incerteza com menor custo possível, por isso entender a relação entre precisão e custo ajuda na hora de tomar decisão de qual método usar”, detalha o professor.

Ou seja, quando pensamos em produzir combustíveis sustentáveis mais eficientemente, tudo se reduz a processos fundamentais de interação molecular e como fazê-los de forma mais eficiente e em uma grande escala. Por isso, para Antonio, o caminho é otimizar processos de catálise e conversão de

energia e escalonar as descobertas. “Garantir que os números que saem do computador são bons é o primeiro passo para uma pesquisa bem sucedida”, conclui o docente.

Da academia para o mundo – Enquanto conduz suas pesquisas em colaboração com alunos e outros docentes da instituição, Antonio leciona Físico-Química e Química Geral no IQSC. No Instituto desde setembro, o docente já acumula nove anos de experiência como professor, tendo ministrado na Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto. Ele encara o trabalho com o propósito de transformar o mundo ao nosso redor. Para o professor, seu papel como acadêmico é se perguntar quais são os problemas importantes do planeta e qual a contribuição mais significativa que ele pode fazer. Por isso, sua meta é contribuir não apenas para a ciência, mas também para a formação de novas gerações de pesquisadores.

Nesse sentido, Antonio acredita no poder da comunicação com seus alunos e com a comunidade acadêmica. Ele elogia a receptividade e sabedoria dos docentes e aponta a excelência das pesquisas realizadas como grande motivador ao escolher o Instituto como espaço para seguir sua carreira acadêmica: “Tenho certeza que a estrutura fantástica do IQSC vai dar suporte para meu grupo de pesquisa e para os meus estudantes, de maneira competitiva no cenário internacional e nacional”.

Antonio mantém um diálogo aberto, reafirmando que está acessível para discussões sobre seus estudos. “Prestar contas sobre o nosso trabalho é crucial. Isso demonstra que o que fazemos é relevante, que temos impacto e, além disso, é necessário para podermos caminhar para um mundo melhor”, finaliza.

Por Carolina Pelegrin, da Assessoria de Comunicação do IQSC