

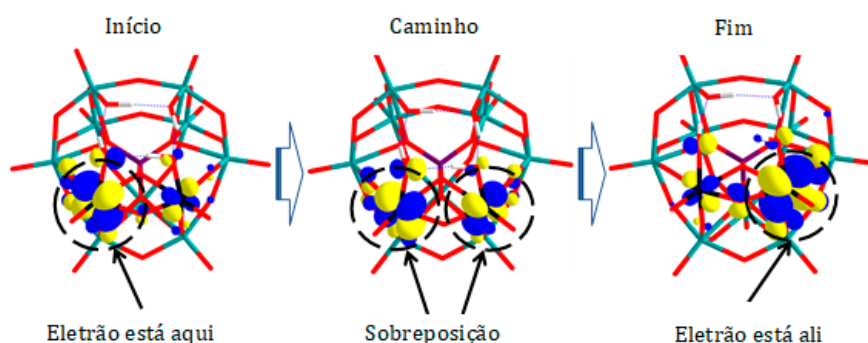
# Transferência eletrónica vista com a lente da Química Quântica

Os fenómenos de transferência de eletrões são omnipresentes em toda a natureza e em Biologia Molecular representam ainda a “transdução de energia”, isto é o transporte de eletrões através de uma enzima ou proteína.

[Nuno A. G. Bandeira](#), investigador do [Departamento de Química e Bioquímica \(DQB\)](#) da [Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa \(Ciências ULisboa\)](#) e do [Instituto de Biosistemas e Ciências Integrativas \(BioISI\)](#) e [Maria José Calhorda](#), professora jubilada do DQB e investigadora do BioISI, apresentam uma visão geral computacional do transporte de eletrões e dos mecanismos físicos subjacentes de um novo polioxometalato, uma espécie de óxidos de metal molecular, identificado por Huizhang Liu, na altura da elaboração do projeto, investigador de pós-doutoramento e agora CEO da [Jiangsu TOP New Materials Ltd.](#)

Huizhang Liu foi capaz de detetar através de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) um novo polioxometalato. A escolha da composição química da molécula, com dois átomos de molibdénio e nove de tungsténio, foi a estratégia usada para permitir que o eletrão permanecesse confinado a um fragmento contendo os dois átomos de molibdénio, produzindo assim uma quantificação bem-sucedida da velocidade de um eletrão a saltar de um para o outro.

Os resultados desta investigação encontram-se descritos no artigo [“A lacunary tungstomolybdophosphate as an electronic pendulum: The ‘blue’ electron under examination”](#), publicado no Journal of Chemical Physics a 22 de março, e podem ajudar a melhorar a compreensão de como os eletrões se movem nas junções moleculares em dispositivos eletrónicos, ou na transferência de eletrões em biomoléculas com mediação de espécies metálicas.



## Informações:

Ciências ULisboa

Nuno A. G. Bandeira | Email: [nuno.bandeira@ciencias.ulisboa.pt](mailto:nuno.bandeira@ciencias.ulisboa.pt) | Tel: 217 500 845

Figura disponível no [cirrus](#). Legenda: Trajeto de transferência eletrónica num óxido metálico misto de molibdénio e tungsténio