

MATERIAL SUPLEMENTAR

PANORAMA DA QUÍMICA INORGÂNICA NO BRASIL REVISITADO: PERÍODO DE 2002 A 2016

Shirley Nakagaki^{1*}, Geani Maria Ucoski¹, Julio S. Rebouças² e Ana Maria da Costa Ferreira³

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, CEP 81531-980 Curitiba - PR, Brasil

²Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, CEP 58051-900 João Pessoa - PB, Brasil

³Instituto de Química, Universidade de São Paulo, CEP 05513-970 São Paulo – SP, Brasil

*e-mail: shirleyn@ufpr.br

Estratégias adotadas no levantamento das informações

A estratégia utilizada pelos autores no trabalho pioneiro precedente ¹ utilizou como estratégia elencar como objeto de estudo e avaliação todos os pesquisadores (na maioria docentes) cujos nomes constassem em pelo menos um trabalho submetido como resumo, no período compreendido da década de 90, a Reuniões Anuais da SBQ e/ou dos simpósios e congressos associados, ou seja, *Simpósio Nacional de Química Inorgânica* (SNQI) ou seu sucessor *Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry* (BMIC). Nesse levantamento anterior foram selecionados aproximadamente 700 autores. Em seguida, os autores encontrados tiveram sua produção científica pesquisada na plataforma WEB-ISI, restringindo-se o endereço a “Brazil”, para considerar apenas os trabalhos em que o local de origem do pesquisador brasileiro indicado no trabalho fosse o Brasil. Foram encontradas 4392 publicações no período de 1977 a 2001, as quais passaram por uma seleção visando caracterizá-las como trabalhos decorrentes de estudos inorgânicos. Após essa seleção, chegou-se a 2273 publicações, as quais foram então analisadas com maior detalhamento.¹

Seguindo essa mesma estratégia e utilizando as informações disponibilizadas para os Diretores de Divisões Científicas da SBQ,² foram considerados todos os pesquisadores (docentes), sejam de Universidades públicas ou Instituições privadas de Ensino Superior relacionadas à área de Química Inorgânica, ou ainda de Institutos Federais de Educação e Pesquisa, cujos nomes constassem em pelo menos um trabalho, no período de 2002 a 2016, nos resumos submetidos às

Reuniões Anuais da SBQ. Além disso, foram também levantados os nomes de pesquisadores que submeteram seus trabalhos às diversas edições do BMIC que ocorreram no mesmo período de 2002 a 2016. Dessa forma, foram analisadas as listas de inscrição de trabalhos referentes à 25ª RA/SBQ até a 39ª RA/SBQ. Adicionalmente, foram considerados os eventos BMIC desde a edição 11ª (Ouro Preto-MG, em 2006) até a 18ª (São Pedro-SP, em 2016), onde algumas informações de inscrição também puderam ser obtidas. Nessa pesquisa foram levantados um total de 405 pesquisadores. Este conjunto de 405 pesquisadores brasileiros atuantes na Química Inorgânica no âmbito dos trabalhos submetidos à Divisão de Química Inorgânica da SBQ e eventos BMIC serão doravante referidos neste trabalho como o conjunto “PQ-INO-SBQ/BMIC”.

Em seguida, foi feito um levantamento da produção científica de todos os membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC arrolados no período de 2002 até o presente (incluindo janeiro de 2017), colocando-se também como filtro o endereço “Brazil”. Similarmente ao que fizeram os autores em 2002, foram incluídos apenas os trabalhos em que o local de origem do(s) pesquisador(es) brasileiro(s) indicado(s) no trabalho fosse o Brasil. Também, como feito anteriormente no primeiro trabalho,¹ os nomes contendo muitas variantes como, de, dos, das, jr., Filho, Junior, etc. foram pesquisados de diferentes maneiras visando encontrar a produção real do pesquisador. Adicionalmente foram consultadas, para cada membro do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC, paralelamente à consulta no WEB/ISI e WEB of Science, as informações obtidas no Currículo Lattes do CNPq. Nessa base de dados puderam ser levantadas as informações de publicações no período (quantidade), índice h (repercussão), se bolsista de produtividade, origem e ano de titulação do pesquisador em questão. Ressaltamos aqui que, durante o levantamento da produção científica de cada pesquisador na WEB, já foi feita uma pré-triagem dos trabalhos a fim de serem selecionados apenas os trabalhos tipicamente relacionados à pesquisa inorgânica, nos seus vários aspectos. Como feito, na publicação de 2002, além dos pesquisadores que atuam tradicionalmente nesta área também foram incluídos autores muitas vezes não sistematicamente atuantes na área de Química Inorgânica. Esse levantamento resultou em 3342 arquivos que, utilizando a programa EndNote® como armazenamento, foram posteriormente reanalisados visando caracterizar os trabalhos de fato relacionados a pesquisas na área inorgânica. Foram excluídas contribuições para revistas não relacionadas diretamente à área ou à química, bem como pesquisas muito distantes dos interesses abrangentes da Química Inorgânica. Nessa triagem restaram então 3006 trabalhos.

Se somarmos toda a produção declarada pelos membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC no Lattes e a produção encontrada na WEB no período, observamos que os números não são iguais. Esse fato está relacionado a vários fatores sendo o mais facilmente compreendido o fato de que

algumas produções declaradas pelos pesquisadores não são indexadas, de forma a serem encontradas nas buscas. Além disso, o fato da busca ter sido feita pelo nome do pesquisador também pode levar a essas divergências visto que nem sempre se conseguiu encontrar a produção declarada conforme a forma de citação recomendada pelo pesquisador no seu Currículo Lattes. Mesmo assim o número de publicações encontrado, embora relativo e não absoluto, é um valor mínimo e aponta para uma tendência na produtividade acadêmica dos membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC e, novamente, como o trabalho de 2002 já apontou, com certeza é também válido e revelador.

Vale ressaltar que foram encontradas também várias contribuições na forma de patentes concedidas, livros editados e capítulos de livros, além de artigos publicados em revistas científicas nacionais e internacionais. No entanto, as análises se restringirão aqui aos artigos publicados, a fim de permitir comparações com o trabalho anteriormente realizado.¹

Tabela 1S. Principais publicações utilizadas por membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC, no período de 2002 a janeiro de 2017^a

Publicação	Fator de impacto ^b	Número de artigos		Publicação	Fator de impacto ^b	Número de artigos	
		1977-2001 ^c	2002-2017			1977-2001 ^c	2002-2017
Quim. Nova	0,617	84	138	J. Catal.	7,354	-	29
J. Braz. Chem. Soc.	1,096	102	137	J. Luminescence	2,693	23	28
Polyhedron	2,108	91	96	J. Phys. Chem. C	4,509	-	28
Inorg. Chim. Acta	1,918	100	74	J. Sol-Gel Sci. Technology	1,473	9	27
J. Mol. Struct.	1,780	22	73	J. Non-Cryst. Solids	1,825	77	26
Inorg. Chem.	4,820	65	63	J. Phys. Chem.	3,187	-	25
J. Coll. Interf. Sci.	3,782	39	62	RSC Advances	3,289	-	25
J. Inorg. Biochem.	3,205	41	60	J. Alloys and Compd.	3,014	90	23
J. Therm. Anal. Calorim.	1,781	35	58	Langmuir	3,993	17	23
J. Mol. Catal. A: Chem.	3,958	41	53	Phys. Chem. Chem. Phys.	4,449	-	23
Appl. Catal. A: Gen.	4,012	12	51	Thermochim. Acta	1,938	115	22
Spectrochim. Acta Part A	2,653	16	50	Eur. J. Inorg. Chem.	2,686	-	21
Inorg. Chem. Commun.	1,762	-	42	Mater. Chem. Phys.	2,101	-	21
Acta Crystallogr. E	0,210 ^d	-	40	Mater. Lett.	2,437	-	21
Dalton Trans.	4,177	47	36	Z. Anorg. Allg. Chem.	1,261	30	21
Electrochim. Acta	4,803	18	35	Mater. Res. Bull.	2,435	-	20
Carbohydrate Polymers	4,219	-	33	total			1544
J. Hazardous Materials	4,836	-	30	Outras revistas	-		1462
Micropor. Mesopor. Mater.	3,349	-	30	total			3006

^aForam encontradas um total de 364 revistas onde os pesquisadores publicaram seus resultados. Na tabela foram incluídas apenas as 35 revistas que apresentaram 20 ou mais publicações de membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC, durante o período analisado. As demais revistas agrupadas na linha “outras revistas” contam com 1 a 19 artigos publicados no período perfazendo total de 1462 artigos. ^bFatores de Impacto provenientes do 2015 Journal Citation Reports® disponibilizado por Thomson Reuters, 2016. ^cInformações obtidas na referência 1. ^dFator de impacto inexistente no 2015 Journal Citation Reports®; valor incluídos na Tabela refere-se ao “Journal Impact” disponível em https://www.researchgate.net/journal/1600-5368_Acta_Crystallographica_Section_E_Structure_Reports_Online.

Principais linhas de pesquisa

Palavras-chave constavam em apenas 2998 publicações do universo pesquisado de 3006. Foram encontradas 639 palavras-chave diferentes que apareceram explicitamente em pelo menos 20 artigos, sendo que 525 delas estão listadas na Tabela 2S. Algumas foram colocadas como palavras-chave simples, como em “Copper”, “Oxidation”, etc., enquanto outras foram agrupadas como em “Porphyrin/metalloporphyrin/phthalocyanine” ou “Electrochemical/electrode/voltammetry/redox” relacionando vários termos correlatos e suas variações. Algumas dessas palavras-chave são muito gerais (por exemplo, “Acid/acids” ou “Aqueous-solution/aqueous-solutions”) e pouco indica sobre os temas tratados nas publicações. Porém, a análise da maioria delas já permite verificar algumas tendências.

Os termos “Complex/coordination/ligand”, “Spectroscopy/FTIR/Raman/EPR/RMN/UV-Vis”, “Crystal structure/X-ray structure/X-ray-diffraction” e “Compound preparation” apareceram em 25,7%, 20,4%, 18,9% e 15,7%, respectivamente do total de artigos analisados, mostrando serem temas bastante estudados entre nós.

É interessante notar também que os termos “Copper” e “Ruthenium” são citados em 6,8 e 5,9% das publicações. Se correlacionarmos esses números com aqueles dos 4 termos mais citados (indicados acima, com mais de 15% de citação) percebe-se uma predominância de compostos desses metais nos estudos. No caso de rutênio, é patente a influência de Henri Taube,³ ganhador do Prêmio Nobel de Química em 1983, que orientou ou supervisionou diversos pesquisadores brasileiros nas décadas de 70 e 80, que por sua vez foram muito produtivos e influenciaram as novas gerações de pesquisadores.

Adicionalmente, é interessante notar também que boa parte da comunidade trabalha com compostos relativos a cobre (6,8%), rutênio (5,9%) e ferro (2,7%), perfazendo um total de 15,4% dos artigos analisados, que citam um desses metais em diferentes compostos. Esse mesmo comportamento já havia sido destacado nas pesquisas até 2002. Os compostos de cobre são os mais citados agora, em contraponto à pesquisa anterior que mostrava o ferro. No entanto, compostos de outros metais, como níquel (4,8%) e európio (4,8%) que mereciam destaque na pesquisa de 2002, no levantamento atual aparecem como palavras-chave em pouco mais de 2% do total de trabalhos analisados. Ainda nesse tópico, outros 13 metais diferentes foram citados, ainda que poucas vezes em compostos nomeados em palavras-chave, e foram agrupados na linha “Outros metais” (vide rodapé da Tabela 2S).

Destacam-se ainda outros termos nesta análise, como o denominado “Medicinal”, agregando uma série de palavras-chave, que não apareceu na análise anterior e que foi citado agora em 16,4 % dos artigos selecionados. Se combinarmos este termo com outros relacionados, como “Nitric-oxide/nitrosyl complexes” (4,2%), a percentagem cresce para >20%. Anteriormente, revistas focalizadas neste tema, como o *J. Inorg. Biochem.*, haviam publicado 41 trabalhos brasileiros e mais recentemente esse número passou a 60. Sob o termo correlato “Bioinorganic/mimic/biomimetic”, 16 artigos haviam sido publicados no período anterior, representando 0,7% de um total de 2273 trabalhos analisados,¹ enquanto neste novo período apareceram 133 artigos, representando 4,4% do total de publicações. Estas são sub-áreas, Química Inorgânica Medicinal e Química Bioinorgânica, que cresceram bastante ao longo destes últimos 15 anos no Brasil, acompanhando a tendência global de preocupação com a saúde, com o funcionamento dos sistemas biológicos e com a necessidade de inovação no desenvolvimento de novos fármacos.

Também o número de publicações selecionadas sob os termos “Nano” (15,9%), “Materials” (15,2%), “Catalysis/ catalyst/ kinetics/ active-site” (14,5%), “Electrochemical/ electrode/ voltammetry/ redox” (13,5%), “Oxidation” (11,4%), “Porphyrin/metalloporphyrin/phthalocyanine” (10,2%) e “Sol-gel/silica/mesoporous silica” (9,7%) mereceram destaque neste novo período de análise.

Comparando-se as palavras-chave “porphyrin” nos dados de 2002 com “Porphyrin/metalloporphyrin/phthalocyanine” utilizado agora, este tema teve um crescimento substancial, passando de 4,2% para 10,2% do total de trabalhos analisados. Aqui também cabe um comentário sobre a origem de tantos grupos utilizando este termo, muitos deles tendo como ponto de partida os trabalhos do grupo de Pesquisa de John Groves⁴ e, posteriormente, os de Bernard Meunier⁵ e de Teddy G. Traylor,⁶ pioneiros na preparação e estudos catalíticos envolvendo metaloporfirinas sintéticas em estudos bioinspirados. Diferentes gerações de pesquisadores brasileiros, influenciados por esses pioneiros, consolidaram novos grupos de pesquisa, dando continuidade e estendendo esses estudos de compostos porfirínicos e correlatos para outras sub-áreas (medicinal, materiais, nanocompostos, etc.) além da catálise.

Alguns termos, ao contrário, apresentaram queda de citação nas palavras-chave ao longo destes 15 anos, como “rare earth/lanthanides” (10,4%), “luminescence” (8,6%) e “thermal/thermochemistry” (14,3%). Esses termos representavam uma fatia substancial dentre os trabalhos analisados em 2002,¹ mas aparecem muito menos nesta nova análise. A primeira não aparece como tal nesta análise enquanto as outras duas aparecem com 5,2 e 2,3%,

respectivamente. Pode ser que anteriormente essas palavras-chave estivessem relacionadas fundamentalmente à caracterização de compostos e que agora apareçam mais nos termos relacionados às suas aplicações, como materiais, fotoquímica, catálise, etc. Também cabe destacar que os trabalhos relacionados a terras raras, dentro da área de Inorgânica, podem ter em grande parte migrado para a área de Físico-Química (Fotoquímica, principalmente), tanto em relação a artigos em revistas, como à participação de pesquisadores em reuniões e eventos da SBQ. Não obstante, “Europium” aparece como um dos 8 metais explicitamente identificado como palavra-chave no universo de trabalhos analisados.

Muitas palavras-chave puderam ser agregadas em grupos mais gerais abrangendo preparação e/ou aplicação, como é o caso dos termos “Oxidation” (11,4%), “Magnetic properties” (3,2%) e “Nitric-oxide/nitrosyl complexes”. Digno de nota é o aparecimento do grupo “Calculation/dft/ab-initio/molecular calculations”, agregando palavras-chave vinculadas à química computacional e/ou teórica, correspondendo a 4,9% dos trabalhos analisados e mostrando uma tendência importante dos trabalhos de pesquisa dos últimos 15 anos.

Particularmente, a análise cruzada dos grupos da Tabela S2 também sugere grandes temas de pesquisa ocorrentes na área. Por exemplo, as palavras-chave agregadas nos grupos “Carbon/graphene/carbon nanotubes”, “Clay/kaolinite/montmorillonite/perovskite”, “Nano”, “Sol-gel/silica/mesoporous silica”, “Polymer” e “Film/thin films/monolayers/Langmuir-Blodgett” sugerem uma grande quantidade de trabalhos voltados para o tema de Materiais e Química do estado sólido. Além disso, os termos “photochemistry/photosensitizers/PDT/TiO₂”, “Electrochemical/electrode/voltammetry/redox”, “Oxidation” e “Biodiesel/esterification/transesterification” se relacionam fortemente ao tema Catálise. O mesmo pode ser visto no tema “Porphyrin/metalloporphyrin/phthalocyanine” em conjunto com “Bioinorganic/mimetic/biomimetic” e “Nitric oxide/nitrosyl complexes” que podem ser em parte relacionados à Química Medicinal.

Tabela 2S. Palavras-Chave e grupos de Palavras-Chaves mais utilizadas em artigos de membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC

Palavras-Chave	Número de Artigos		Grupos de Palavras-chave ^a	Número de Artigos	
		Porcentagem (%)			Porcentagem (%)
Chemistry	122	4,1	Compound preparation ^e	472	15,7
Reactivity	73	2,4	Materials ^f	456	15,2
Molecular structure	66	2,2	Catalysis/catalyst/kinetics/active-site ^g	435	14,5
Grupos de palavras-chave^a			Electrochemical/electrode/voltammetry/redox	406	13,5
Copper	205	6,8	Oxidation ^h	341	11,4
Ruthenium	178	5,9	Porphyrin/metalloporphyrin/phthalocyanine	305	10,2
Iron	82	2,7	Sol-gel/silica/mesoporous silica	290	9,7
Cobalt	58	1,9	Photochemistry/photosensitizers/PDT/TiO ₂	232	7,7
Platinum	58	1,9	Film/thin films/monolayers/Langmuir-Blodgett	226	7,5
Zinc	33	1,1	Polymer ⁱ	187	6,2
Europium	33	1,1	Luminescence	156	5,2
Palladium	32	1,1	Calculation/dft/ab-initio/molecular calculations	148	4,9
Nickel	24	0,8	Bioinorganic/mimetic/biomimetic	133	4,4
Manganese	11	0,4	Nitric-oxide/nitrosyl complexes	127	4,2
Vanadium	9	0,3	Acid/acids	102	3,4
Other metals ^b	100	3,3	Magnetic properties	95	3,2
Complex/coordination/ligand	769	25,7	Carbon/graphene/carbon nanotubes	92	3,1
Spectroscopy/FTIR/Raman/EPR/RMN/UV-Vis ^c	611	20,4	Biodiesel/esterification/transesterification/	86	2,9
Crystal structure/X-ray structure/X-ray diffraction	566	18,9	Clay/kaolinite/montmorillonite/perovskite	81	2,7
Medicinal ^d	492	16,4	Aqueous-solution/aqueous-solutions	75	2,5
Nano	477	15,9	Thermal analysis/thermochemistry	68	2,3

^aForam consideradas palavras-chave simples ou compostas; algumas palavras correlacionadas foram agrupadas, conforme explicado a seguir. No caso dos metais, o nome de cada metal agrupa todas as palavras-chave de compostos daquele metal, citados como palavra-chave nos artigos. A única exceção são os compostos de metaloporfirinas que foram agrupados em grupo próprio. Por exemplo, a palavra-chave “Dicopper(II) complex” foi adicionada ao grupo “Copper” mas a palavra-chave “Copper(II) porphyrin” foi adicionada ao grupo “Porphyrin/metalloporphyrin/phthalocyanine”. ^b“Other metals” referem-se a trabalhos sobre: Tb, Sn, Os, Mo, Sb, Bi, Cd, Cr, Ga, Au, Hg, Re e Ag. ^c Aqui, todas as palavras simples ou compostas associadas às técnicas espectroscópicas de análise, como por exemplo, “vibrational spectroscopy”, “infrared-spectra”, “electronic spectra”, etc. foram agrupadas. ^d Palavras como “*in vitro*”, “cytotoxicity”, DNA (e palavras associadas), “câncer”, “cells”, “drug delivery”, “apoptosis”, “cytotoxic activity”, “antibacterial”, “antitumor”, “antimicrobial

activity”, “*Escherichia coli*”, “controlled release” e “toxicity” foram agrupadas neste termo. ^e Agrupamento de todas as palavras-chave associadas à preparação de compostos, como por exemplo: “immobilization”, “adsorption”, “hydrothermal synthesis”, “intercalation”, “functionalization”, etc. ^f Palavras associadas a: materiais, novos materiais, “composite”, “ceramic”, “glass”, “solid state”, alumina, “hybrid”; além de todas as variações contendo essas palavras. ^g Inclui também todas as palavras-chave compostas contendo a palavra “catalysis”. ^h Foram agrupadas aqui outras palavras-chaves relacionadas a “Oxidation”: “molecular oxygen”, “oxygen”, “iodosylbenzene”, “hydrogen peroxide”, “hydroxylation” e “epoxydation”. ⁱ Outras palavras-chave associadas no grupo: “polymerization”, “polyaniline”, “coordination polymers” e “conducting polymers”.

Tabela 3S. Titulação dos pesquisadores membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC (Fonte: Currículo Lattes CNPq).

área de titulação	Número (%)
doutorado em ciências	2,48
doutorado em físico-química	5,46
doutorado em química inorgânica	24,81
doutorado em química	56,08
outras categorias de doutorado (áreas afins)	11,17

Tabela 4S. Informações sobre a década de titulação (doutoramento) dos pesquisadores membros do grupo PQ-INO-SBQ/BMIC analisados nessa pesquisa.

Década de conclusão doutorado	Número de Pesquisadores	% por período
1968-1978	28	6,94
1979-1989	43	10,66
1990-2000	162	40,19
2001-2010	138	34,24
2011-2017	32	7,94
Informação não disponível	2	-
total	405	100

REFERÊNCIAS

1. Toma, H. E.; Ferreira, A. M. C.; Serra, O. A.; *Quim. Nova* **2002**, *25*, 66.
2. <http://www.sec.sbq.org.br/divisao/>, acessada em janeiro 2017.
3. Toma, H. E.; *J. Braz. Chem. Soc.* (**2005**), doi.org/10.1590/S0103-50532005000700001
4. Groves, J. T.; Nemo, T. E.; Myers, R. S.; *J. Am. Chem. Soc.* **1979**, *101*, 1032.
5. De Carvalho, M. E.; Meunier, B.; *Tetrahedron Lett.* **1983**, *24*, 3621.
6. Traylor, T. G.; Iamamoto, Y.; Nakano, T.; *J. Am. Chem. Soc.* **1986**, *108*, 3529.