

Título	Design de macrociclos para o reconhecimento de aniões nocivos ao ambiente
Resumo	<p>A química supramolecular, é a química das interações intermoleculares de natureza não covalente. Esta área da química tem sido uma das que mais se tem desenvolvido nas últimas décadas. Em particular, a química analítica supramolecular envolve a aplicação dos conceitos da química analítica a recetores sintéticos desenvolvidos para o reconhecimento molecular. Sendo, portanto, uma das áreas emergentes da química de maior interdisciplinaridade-</p> <p>O <i>design</i> de recetores sintéticos baseados nos princípios de reconhecimento molecular (complementaridade estrutural e eletrónica entre o recetor e anião, balanço entre rigidez e a flexibilidade no recetor) têm vindo a ser explorados pelo nosso grupo de investigação no âmbito de um projeto FCT.</p> <p>Neste projeto, pretende-se inicialmente sintetizar um ou dois macrociclos decorados com unidades ureia os quais serão posteriormente usados para o reconhecimento de aniões prejudiciais ao meio ambiente (sulfato, hidrogenofosfato, ftlatos, etc.). A interação macrociclo-anião será estabelecida através de forças intermoleculares (ligações de hidrogénio, electroestáticas, etc.) e a “força” dessa interação medida através da determinação das constantes de associação utilizando técnicas analíticas de titulações espectroscópicas de RMN e UV-vis.</p> <p>No decorrer deste projeto o aluno terá oportunidade de consolidar os conhecimentos em síntese orgânica, métodos comuns de caracterização (RMN, FT-IR, ESI-MS, etc) e metodologias usadas em química supramolecular.</p> <p>Na determinação das constantes de associação recetor-anião serão usados programas existentes comercialmente. Para uma associação macrociclo-anião será determinada a incerteza da constante de associação considerando as incertezas da determinação da saturação da curva isotérmica, e das medições de volume e massa relevantes para o cálculo da concentração das soluções. Este trabalho permitirá otimizar a incerteza da determinação das constantes de associação através da redução das componentes maioritárias.</p>
Local de trabalho	DQB/FCUL laboratório 8.5.55 e 8.3.39
Orientador (es)	Sílvia Carvalho
Informações	scfcarvalho@ciencias.ulisboa.pt