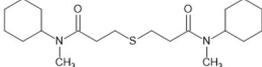




LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

1	TÍTULO:	Estudo da adição de alcoóis (butanol e pentanol) a biodiesel na formulação de novos bio-combustíveis
RESUMO:	<p>Durante anos, os elevados preços do petróleo, as alterações climáticas e as emissões de CO₂ manifestaram-se na legislação, que tem servido para incentivar a produção de biocombustíveis. Estudos recentes demonstraram o potencial do n-butanol e n-pentanol como aditivo para o biodiesel em substituição do gasóleo petrolífero, para além da sua capacidade de atuar como drop-in fuel. Capaz de provir de uma fonte renovável, estes biocombustíveis quando adicionados ao biodiesel reduzem a sua densidade e viscosidade, melhoram o processo de combustão e potencialmente reduzem as emissões de CO₂ e CO. Neste trabalho estudar-se-á o efeito da adição de butanol e pentanol ao biodiesel com o objetivo de determinar qual(ais) o(s) melhor(es) candidato(s) para atuar como aditivo e também quais as proporções com maior interesse industrial. Serão considerados neste estudo todos os isómeros de cada álcool assim como possíveis misturas binárias dos mesmos. Serão utilizadas técnicas de caracterização entre as quais densimetria, reologia, calorimetria de combustão entre outras.</p>	
ORIENTADOR(ES):	Ana Cristino, afcrisino@ciencias.ulisboa.pt ; Rui Galhano (IST)	
LOCAL:		
2	TÍTULO:	Desenvolvimento de uma biblioteca de C-glicósidos com potencial atividade bactericida em bactérias multirresistentes Gram-negativas: Design, síntese e avaliação biológica
RESUMO:	<p>O fenómeno de resistência a antibióticos ocorre quando uma célula bacteriana adquire ou desenvolve mecanismos de evasão a uma ou mais moléculas com ação antibacteriana. Como consequência do uso global e indiscriminado destes fármacos nos sistemas de saúde, na indústria e no sector da agropecuária, a emergência de estirpes bacterianas resistentes a vários tipos de antibióticos, incluindo os de última linha, representa um problema de saúde pública crescente para o qual são necessárias soluções inovadoras e eficazes a curto prazo.¹ Neste contexto, a Organização Mundial de Saúde (OMS) destaca o combate às bactérias multirresistentes de Gram negativo como uma das mais importantes prioridades de Saúde Pública na década corrente, evidenciando <i>P. aeruginosa</i> resistente a carbapenemes (CRPA), <i>A. baumannii</i> resistente a carbapenemes (CRAB) e <i>Enterobacteriaceae</i> resistentes a carbapenemes (CRE) como os agentes patogénicos de prioridade crítica.² Nos últimos anos, o Grupo de Química de Glúcidos da FCUL tem direcionado esforços para a investigação de desoxiglicoconjugados com afinidade para a fosfatidiletanolamina e, consequente, ação surfactante ao nível da membrana de bactérias Gram positivas.³ Com o intuito de dar resposta às necessidades atuais definidas pela OMS, este projeto visa a síntese de uma pequena biblioteca de C-glicósidos de alquilo com potencial atividade bactericida em bactérias multirresistentes Gram-negativas quando combinados com agentes adjuvantes que permitam a sua passagem através da membrana externa (ME), possibilitando, assim, a sua ação ao nível da membrana interna (MI). Os compostos-alvo serão análogos estruturais do O-glicósido <i>lead</i> - 4,6-didesoxi-α-D-xylo-hexopiranosídeo de dodecilo (1) - que demonstrou ser o mais promissor de todos os desoxiglicoconjugados anteriormente estudados em bactérias Gram positivas.³ Neste contexto, os objetivos a atingir com este projeto são:</p> <p>Síntese e purificação de análogos C-glicosilados do desoxiglicoconjugado <i>lead</i> (1) a partir do α-D-glicopiranosídeo de metilo com vista à obtenção das seguintes alterações estruturais:</p> <p>Substituição biosostérica O \rightarrow C na posição anomérica</p> <p>Variação do comprimento da cadeia alquílica</p> <p>Introdução de grupos aromáticos e/ou outras unidades estruturais lipofílicas na aglicona</p> <p>Caracterização estrutural de todos os compostos obtidos por RMN (¹H, ¹³C, DEPT, COSY, HMQC, HMBC e, se necessário, NOESY), rotação ótica específica e ponto de fusão.</p> <p>Avaliação da atividade bactericida dos compostos sintetizados em CRPA, CRAB e CRE em combinação com polimixina B ou polimixina E, com determinação da concentração inibitória mínima (CIM).</p> <p>Referências:</p> <ol style="list-style-type: none"> Christaki E, Marcou M, Tofarides A. J Mol Evol. 2020;88(1):26-40. Brejijeh Z, Jubeh B, Karaman R. Molecules. 2020;25(6):1340. Dias C, Pais JP, Nunes R, et al. Nat Commun. 2018 Nov 19;9(1):4857. 	
ORIENTADOR(ES):	Ana Matos, amamatos@fc.ul.pt ; Manuela Caniça (INSA)	
LOCAL:		
3	TÍTULO:	Extracção por solventes na recuperação de platina e paládio
RESUMO:	<p>Os metais do grupo da platina (PGMs) exibem propriedades únicas que lhes garantem uma extensa aplicação tecnológica, pelo que o seu elevado valor económico, difícil substituição e raridade têm determinado a classificação dos PGMs pela União Europeia como matérias-primas críticas. A actividade catalítica dos PGMs é a propriedade mais explorada, sendo que é nesta função que se centram as suas principais utilizações, destacando-se os catalisadores automóveis (imprescindíveis para a minimização da emissão dos gases de escape tóxicos provenientes dos motores de combustão), e os catalisadores industriais (por exemplo, na refinação do petróleo e nas indústrias petroquímica e farmacêutica). Esta proposta de dissertação vem na sequência de investigação anterior, que visa contribuir para o desenvolvimento de operações hidrometalúrgicas que permitam uma boa recuperação de PGMs, nomeadamente platina e paládio, de dispositivos tecnológicos em fim de vida, tais como catalisadores automóveis ou industriais. Pretende-se prosseguir a investigação com a avaliação da <i>performance</i> para a extracção por solventes de Pt e Pd de um novo extractante orgânico, <i>N,N'</i>-dimetil-<i>N,N'</i>-díciclohexiltiodipropenamida (DMDCHTDPA) – Figura 1 - semelhante a outro já anteriormente testado, <i>N,N'</i>-dimetil-<i>N,N'</i>-díciclohexiltiodiglicolamida (DMDCHTDGA) [1,2].</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p style="text-align: center;"><i>Figura 1. Estrutura da DMDCHTDPA</i></p> <p>Após a síntese e caracterização da DMDCHTDPA serão realizados testes sistemáticos para avaliar as eficiências de extracção, selectividade e reacções de extracção de Pt e Pd. Comparar-se-ão os resultados encontrados com os já conhecidos relativamente à DMDCHTDGA [1,2] e outros extractantes comerciais, particularmente o Cyanex® 471X e o Cyphos® IL 101 [3]. Se se revelar promissora,</p>	



LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

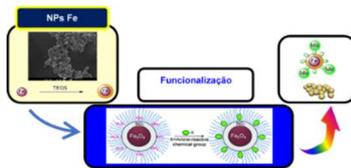
		<p>a DMDCHTDPA poderá ainda ser testada para a recuperação de Pt e Pd de soluções de lixiviação reais. Na avaliação da capacidade extractiva dos solventes orgânicos serão usadas técnicas de extracção líquido-líquido. O conteúdo metálico nas soluções aquosas envolvidas será avaliado por espectroscopia de absorção atómica, EAA, e por espectroscopia de emissão atómica por plasma induzido (ICP-AES).</p> <p>[1] O. Ortet, A.P. Paiva, <i>Sep. Purif. Technol.</i> 156 (2015) 363 [2] A.P. Paiva, O. Ortet, G.I. Carvalho, C.A. Nogueira, <i>Hydrometallurgy</i> 171 (2017) 394 [3] A.P. Paiva, F.V. Piedras, P.G. Rodrigues, C.A. Nogueira, <i>Sep. Purif. Technol.</i> 286 (2022) 120474</p>
	ORIENTADOR(ES):	Paula Paiva, appaiva@ciencias.ulisboa.pt
	LOCAL:	 
4	TÍTULO:	Desenvolvimento de carvões ativados em pó a partir de cascas de pinhão para purificação de água potável
	RESUMO:	<p>Um dos principais desafios sociais da UE prende-se com a qualidade da água, o que requer a melhoria dos processos de tratamento. O maior desafio relaciona-se com a presença de matéria orgânica natural (ligada às alterações climáticas) e de micropoluentes, ex. compostos que conferem sabor/cheiro ou fármacos resistentes aos tratamentos convencionais. A adsorção com carvão ativado é considerada uma das melhores tecnologias disponíveis para controlar estes contaminantes. O presente tema de mestrado cobre parte do projeto EMPOWER* (PTDC/EQU-EQU/6024/2020) centrando-se no desenvolvimento de novos carvões ativados em pó (PAC) de elevado desempenho obtidos por ativação física de casca de pinhão, para tratamento de água mais eficaz (http://empower.rd.ciencias.ulisboa.pt/). Os materiais serão preparados e caracterizados no Laboratório de Adsorção e Materiais Adsorventes (DQB/CQE/FCUL) seguindo protocolos pré-otimizados [1]. Pretende-se obter materiais com distribuição de tamanhos de partículas adequada à futura aplicação em processos de tratamento de água para consumo humano envolvendo separação por coagulação-floculação-sedimentação (CFS) ou por microfiltração. A eficácia dos materiais preparados na FCUL assim como dos materiais preparados pelo parceiro do EMPOWER* (Supelco/MilliporeSigma/Merck) terá testada em águas reais: ensaios <i>batch</i> para seleção dos materiais com maior desempenho [2]. Independentemente do tipo de ensaio, o desempenho dos materiais será testado em soluções uni-soluto e multi-soluto (condições de competição) para reunir dados que suportem ensaios de modelação. Em paralelo serão testados materiais comerciais de referência para os PAC desenvolvidos. Os ensaios de adsorção em fase líquida decorrerão maioritariamente no Núcleo de Engenharia Sanitária do LNEC (Laboratório Nacional de Engenharia Civil).</p> <p>O aluno terá oportunidade de desenvolver competências complementares:</p> <p>na área da preparação e caracterização de materiais de carbono, nomeadamente ao nível da ativação física com vapor de água, preparação de PAC magnéticos e da adsorção de N₂ a -196 °C para caracterização da estrutura porosa. A caracterização será aprofundada determinando o teor em cinzas, humidade e densidade aparente, análise elementar, caracterização morfológica por SEM/TEM. A caracterização da química superficial será feita por determinação de pH no ponto de carga zero (pH_{pzc}) e/ou FTIR. Os PAC magnéticos serão caracterizados por DRX e as suas propriedades magnéticas também serão avaliadas;</p> <p>na avaliação do potencial de PAC para controlo de contaminantes em fase líquida realizando ensaios de adsorção em <i>batch</i> (i.e. cinéticas e isotérmicas de adsorção); testes de sedimentabilidade para processos de separação convencional por CFS e testes de propensão para <i>fouling</i> no caso dos materiais para aplicações híbridas com membranas.</p> <p>e ainda em monitorização da qualidade da água por técnicas analíticas: técnicas espectroscópicas UV-vis e HPLC para monitorização, respetivamente, da matéria orgânica natural e compostos farmacêuticos; por oxidação química e deteção por IV para determinação de carbono orgânico total e dissolvido (TOC e DOC, respetivamente). A qualidade microbiológica da água purificada será também avaliada.</p> <p>A seleção do(s) candidato(s) está dependente de uma entrevista prévia, visto que o presente tema poderá vir a ser realizado no âmbito de uma bolsa de mestrado financiada pelo Projeto EMPOWER*.</p> <p>Referências</p> <p>[1] A.S. Mestre, A.P. Carvalho, Nanoporous Carbon Synthesis: An Old Story with Exciting New Chapters, in: T.H. Ghrif (Ed.) Porosity - Process, Technologies and Applications, IntechOpen2017, DOI: 10.5772/intechopen.72476. [2] R.M.C. Viegas, A.S. Mestre, E. Mesquita, M. Campinas, M.A. Andrade, A.P. Carvalho, M.J. Rosa, Assessing the applicability of a new carob waste-derived powdered activated carbon to control pharmaceutical compounds in wastewater treatment, <i>Sci. Total Environ.</i> 743 (2020) 140791.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Ana Mestre, asmestre@ciencias.ulisboa.pt ; Elsa Mesquita (LNEC)
	LOCAL:	 
5	TÍTULO:	Desenvolvimento de complexos de ruténio para terapia dirigida do cancro
	RESUMO:	<p>O Grupo de Química Biorganometálica da FCUL tem vindo a desenvolver de forma bem-sucedida metalofármacos de ruténio.[1] Entre eles destaca-se o conjugado de ruténio-polímero pmc78 que apresenta potencial para tratar não só o cancro primário, como também as suas metástases – cancros secundários que são, na maioria das vezes, os principais causadores de morte por cancro.[2-3] Em concreto, o pmc78 tem mostrado resultados excecionais para o tratamento do cancro da mama triplo negativo, um tipo de cancro muito agressivo e sem cura. Os estudos para este metalofármaco encontram-se numa fase avançada de desenvolvimento no âmbito da <i>spin-off</i> da FCUL, R-nuucell (http://www.r-nuucell.com/), da qual Andreia Valente, Investigadora do DQB, é co-fundadora. Neste sentido, este projeto tem dois objetivos principais:</p> <p>i) Processo de <i>scale-up</i> da síntese e nanoformulação do composto pmc78 dos miligramas para os gramas. Este ponto está enquadrado no projeto ganho pela R-nuucell recentemente no âmbito do Programa <i>Women TechEU</i> e conta com financiamento para recursos humanos.</p> <p>ii) Partindo do mesmo princípio ativo de ruténio, [Ru(η⁵-C₅H₅)(2,2'-bipiridina)(PPh₃)]⁺, pretende-se desenvolver outros metalofármacos que possam dar resposta a diferentes tipos de cancro sem tratamento, como por exemplo, o cancro do pulmão multirresistente. Desta forma, este projeto oferece uma excelente formação em síntese química, assim como em várias técnicas de caracterização, nomeadamente: síntese e purificação usando técnicas de <i>Schlenk</i> em atmosfera inerte de azoto; técnicas espectroscópicas usuais de FT-IR, RMN (¹H, ¹³C e ³¹P, e técnicas bidimensionais), UV-Vis. A avaliação das potencialidades anti tumorais dos novos compostos será</p>



LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

		<p>feita no âmbito de colaborações do Grupo de Investigação. O presente projeto, situado na área da química biomédica, constitui uma importante contribuição para a investigação na área do cancro.</p> <p>Referências:</p> <p>[1] A. Valente, T. S. Morais, R. G. Teixeira, C. P. Matos, A. I. Tomaz, M. H. Garcia, "Ruthenium and iron metallodrugs: new inorganic and organometallic complexes as prospective anticancer agents", Chp 6. In <i>Synthetic Inorganic Chemistry, New Perspectives</i>. Editor: Ewan Hamilton, Elsevier; 2021, Pages 223-276. ISBN: 978-0-12-818429-5</p> <p>[2] Garcia, M.H.; Valente, A.; Morais, T.S.F.; Tomaz, A.I.; <i>Macromolecular Transition Metal Complexes For Treatment Of Cancer And Process For Their Preparation</i>, PT108082B, EA038640B1, EP3227307B1, CN107466297B, JP6726678B2, US15/533,289, under examination on Canada, Brazil and India)</p> <p>[3] T. Moreira, R. Francisco, E. Comsa, S. Duban-Deweere, V. Labas, A.-P. Teixeira-Gomes, L. Combes-Soia, F. Marques, A. Matos, A. Favrelle, C. Rousseau, P. Zinck, P. Falson, M. H. Garcia, A. Preto, A. Valente, "Polymer "ruthenium-cyclopentadienyl" conjugates - new emerging anti-cancer drugs". <i>Eur J Med Chem</i> 2019, 168, 373-384</p>
	ORIENTADOR(ES):	Andreia Valente, amvalente@ciencias.ulisboa.pt
	LOCAL:	 
6	TÍTULO:	Plataformas eletroquímicas ultra-sensíveis para a deteção de DNA
	RESUMO:	<p>A deteção simples, rápida e sobretudo sensível de ácidos nucleicos (DNA) desempenha um papel crucial na triagem precoce de vários tipos de cancro, diagnóstico de doenças infecciosas, e monitorização da segurança alimentar. O método de reação em cadeia da polimerase (PCR) tem sido amplamente utilizado para a deteção de DNA devido à sua elevada sensibilidade e especificidade, como comprovado globalmente na deteção do SARS-CoV-2. No entanto, os métodos de PCR normalmente requerem equipamentos volumosos, pessoal especializado e longos tempos de análise, limitando sua utilização apenas a laboratórios bem equipados. Deste modo, o desenvolvimento de sensores simples, rápidos, portáteis, que garantam elevada especificidade e sensibilidade são de enorme utilidade. De entre os vários tipos de sensores, os eletroquímicos são os que asseguram a melhor forma todos estes requisitos. Este tema de mestrado propõe, então, desenvolver uma nova plataforma eletroquímica universal e ultra-sensível para detetar moléculas de DNA alvo, que combina: uma tecnologia recente, denominada de <i>CRISPR (clustered regularly interspaced short palindromic repeats)</i>, que consiste num sistema de tesouras moleculares, especialmente desenhado para reconhecer especificamente uma molécula alvo de DNA, levando de seguida à clivagem indiscriminada de sequências de oligonucleótidos de cadeia simples [1]; e múltiplos processos redox que amplificam o sinal de deteção do analito, nomeadamente sequências de reações redox eletroquímicas e químicas [2], que serão adaptadas para se alcançar uma relação sinal-ruído elevada. A intensidade do processo redox a ocorrer à superfície do eletrodo dependerá fortemente da carga deste. Testar-se-ão eletrodos sem qualquer modificação e após imobilização de filmes nanométricos (ex. monocamadas auto-montadas). O estudante adquirirá experiência em modificação de superfícies de eletrodo e em técnicas eletroquímicas (voltametria cíclica e de onda quadrada, cronoamperometria) e de caracterização de superfícies e interfaces, nomeadamente em elipsometria e microscopia de força atómica. Os materiais biológicos serão adquiridos comercialmente. Esta proposta resulta de uma colaboração com a empresa de I&D Lumi Systems (CARBUS, S.A. https://www.lumi-systems.com/lumi-i-d/), que está a desenvolver dispositivos analíticos na área da segurança alimentar e da saúde.</p> <p>[1] Z. Li, X. Ding, K. Yin, Z. Xu, K. Cooper, C. Liu, <i>Biosensors and Bioelectronics</i>, 192, 2021, 113498, https://doi.org/10.1016/j.bios.2021.113498.</p> <p>[2] G. Dutta, P. B. Lillehoj, <i>Analyst</i>, 2017, 142, 3492–3499, DOI https://doi.org/10.1039/C7AN00789B</p>
	ORIENTADOR(ES):	Ana Viana, anaviana@ciencias.ulisboa.pt ; António Cascalheira (Lumi Systems, CARBUS, S. A.)
	LOCAL:	 
7	TÍTULO:	Racionalização de processos de nucleação de cristais a partir de solução
	RESUMO:	<p>A cristalização a partir de uma solução é um dos processos mais antigos e utilizados para obter sólidos puros. Contudo, os mecanismos moleculares no âmbito deste processo permanecem, em grande parte, desconhecidos. A sua resolução representaria um passo significativo para o controlo das fases cristalinas que são obtidas para um dado composto, permitindo a prevenção de incidentes industriais (como no caso dos fármacos Norvir e Avalide) ou possibilitando o desenvolvimento de novos materiais com propriedades ajustadas tendo em vista uma aplicação específica (e.g., melhorar a sua solubilidade em meios biológicos).</p> <p>A principal dificuldade em controlar a formação de sólidos orgânicos cristalinos a partir de solução, prende-se com o facto do nosso conhecimento sobre a sequência de eventos que ocorrem durante a formação de um cristal – processo de nucleação – ser ainda incipiente. Neste sentido, o trabalho aqui proposto pretende utilizar métodos computacionais e experimentais para racionalizar processos de cristalização. Para alcançar este objetivo, serão estudados fármacos com a capacidade de formar diferentes tipos de ligações intermoleculares (e.g., ligações de hidrogénio e halogénio). Exemplos dos compostos a estudar são a niacina (vitamina B₃, usada no controlo do colesterol), a prasterona (usada no tratamento de problemas hormonais), e o clioquinol (um antifúngico, atualmente em estudo para o tratamento do cancro da próstata). Neste trabalho pretende-se:</p> <p>(i) Estabelecer relações entre as condições de cristalização (por exemplo, concentração das soluções e solvente) e a forma cristalina precipitada. Para o efeito, diferentes condições experimentais serão testadas e os materiais precipitados estudados por difração de raios-X.</p> <p>(ii) Estudar o mecanismo de nucleação a partir da medida de tempos de indução de cristalização em solução.</p> <p>(iii) Averiguar a existência de alterações a nível molecular da organização das moléculas em solução durante o processo de formação dos cristais, utilizando métodos de micro calorimetria diferencial de varrimento e/ou ressonância magnética nuclear.</p> <p>(iv) Utilizar métodos computacionais para obter uma visão microscópica dos eventos que antecedem a nucleação de cristais e o seu crescimento.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Carlos Bernardes, cebernardes@fc.ul.pt
	LOCAL:	 

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

8	TÍTULO:	Desenvolvimento de pequenas moléculas do tipo ureia para o reconhecimento de cloreto e fármacos anti-inflamatórios não esteroides (AINEs)
	RESUMO:	O transporte de iões através das membranas celulares é crucial em vários processos biológicos, como a condução nervosa e a manutenção da homeostasia. O conjunto de canais iónicos proteicos presentes nas membranas controla a concentração de iões tanto no citosol como ao redor da célula. A disfunção destes canais está associada com a ocorrência de patologias graves, designadas de canalopatias, como por exemplo a fibrose quística (FC), provocada pelo transporte deficiente de cloreto através das membranas. Atualmente, a maior parte das terapias para a FC foca-se na gestão dos sintomas da doença, enquanto a cura permanece ainda um desafio. Assim, torna-se essencial o desenvolvimento de transportadores sintéticos como potenciais terapêuticas de substituição dos canais disfuncionais. O estudo das interações não covalentes (predominantemente ligações de hidrogénio) que ocorrem entre os recetores sintéticos baseados em anéis heterocíclicos como benzo[b]tiofeno, capazes de reconhecimento de aniões cloreto, tem sido explorado pelo nosso grupo de investigação. A ligação de isómeros de benzo[b]tiofeno através de unidades (tio)ureia a plataformas aromáticas permitiu a construção de uma biblioteca de pequenas moléculas com capacidade de transporte do ião cloreto e com resultados promissores em células de FC (doi: 10.1002/chem.201904255; doi.org/10.1002/ejoc.202101484). Neste contexto, o trabalho a desenvolver foca-se na síntese de novo(s) recetor(es) formados por isómeros de benzo[b]tiofeno ligados a uma unidade central de amins tripodais através do grupo funcional (tio)ureia. A interação destes recetores com o anião cloreto e fármacos anti-inflamatórios não esteroides (AINEs) será posteriormente avaliada. A caracterização estrutural do(s) novo(s) recetor(es) será realizada utilizando diversas técnicas de caracterização estrutural tais como, RMN, IV, HR-MS-ESI e difração de raios-X. A força da interação dos recetores sintetizados com o cloreto e AINEs irá ser avaliada experimentalmente em solução, por titulação usando a espectroscopia de ¹ H RMN.
	ORIENTADOR(ES):	Cristina Moiteiro, cmmoiteiro@ciencias.ulisboa.pt
	LOCAL:	
9	TÍTULO:	Dessulfurização oxidativa catalítica de combustíveis para um ambiente mais limpo
	RESUMO:	<p>A obtenção de combustíveis limpos de elevada qualidade é de extrema importância para o meio ambiente e para o bem-estar dos seres vivos. Para atingir este objetivo são necessários catalisadores mais seletivos e robustos para serem aplicados na dessulfurização oxidativa (ODS), de modo a atingir as metas impostas pela Comunidade Europeia em termos de emissões. A hidrodessulfurização catalítica (HDS) de petróleo e de combustíveis derivados do mesmo é realizada atualmente a uma temperatura (400 °C) e pressão de hidrogénio (100 atm) elevadas, convertendo compostos orgânicos de enxofre em sulfureto de hidrogénio (H₂S) e hidrocarbonetos. O catalisador usado atualmente nas refinarias é de Co ou Ni suportado em alumina e a reação é promovida por MoS₂, mas é um método com um elevado custo devido à temperatura e pressão elevadas.[1] O elevado custo e a dependência energética têm norteado a procura de novos métodos catalíticos para remover ou converter os compostos de enxofre dos combustíveis. A ODS é um método promissor devido a usar um oxidante (H₂O₂, hidroperóxido de terc-butilo, O₂, etc ...), temperatura e pressão baixas, sendo um processo com impacto ambiental reduzido.[1,2] As nanopartículas (NPs) de metais são usadas cada vez mais na indústria petroquímica devido às excelentes propriedades catalíticas que apresentam e representam uma importante alternativa para serem testadas em catalise, pois possuem elevada área superficial, fácil dispersão em solventes comuns e podem ser usadas como catalisadores ou suportes (semi)heterogéneos de catalisadores. O principal objetivo deste trabalho é desenvolver uma abordagem inovadora e integrada na preparação de catalisadores sustentáveis, de baixo custo e eficientes baseados em nanopartículas magnéticas de ferro (Fe₃O₄) funcionalizadas com óxidos de molibdénio, Fe-MoO_x (x= 2 ou 3). Estes catalisadores serão usados para a remoção ou transformação de compostos de enxofre em moléculas modelo e amostras de combustíveis reais. Tendo como objetivo verificar se irá ser possível observar uma melhoria na performance quando comparado com os catalisadores usados atualmente. A primeira parte do trabalho será dedicada à síntese dos catalisadores de Fe-MoO_x. A segunda parte será a sua aplicação na dessulfurização oxidativa de tióis, sulfuretos, tio-fenóis (moléculas modelo) e amostras reais (fornecidas pela empresa Carmona Group). Pretende-se estudar a conversão, seletividade dos catalisadores. O(s) catalisadores mais promissores serão estudados também quanto ao seu potencial de serem reciclados.</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>Referências:</p> <ol style="list-style-type: none"> M.N. Hossain, H.C. Park, H.S. Choi, A Comprehensive review on catalytic oxidative desulfurization of liquid fuel oil, <i>Catalysts</i>, 2019, 9, 229. http://doi.org/10.3390/catal9030229 A. Rajendran, T.-C. Cui, H.-X. Fan, Z.-F. Yang, J. Feng, W.-L. Li, A comprehensive review on oxidative desulfurization catalysts targeting clean energy and environment. <i>J. Mater. Chem. A</i>, 2020, 8, 2246–2285. http://doi.org/10.1039/c9ta12555h
	ORIENTADOR(ES):	Carla Nunes, cmnunes@fc.ul.pt
	LOCAL:	
10	TÍTULO:	Aplicação de catalisadores heterogéneos na despolimerização redutiva de resíduos de plástico
	RESUMO:	A poluição causada pelos resíduos de plástico é um problema ambiental, económico, social e global. Para além da mudança comportamental/consciencialização do consumidor relativamente à utilização dos plásticos, é também urgente desenvolver novas metodologias para a reciclagem de resíduos de plástico em compostos de valor acrescentado, promovendo a economia circular. Os plásticos estão entre os resíduos mais valiosos e podem ser considerados como uma fonte potencialmente barata para a produção de uma grande variedade de compostos de interesse para várias indústrias. Nos últimos anos, a despolimerização redutiva surgiu como uma excelente metodologia para a valorização de resíduos plásticos.[1] O nosso grupo de investigação demonstrou recentemente que

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

	<p>os catalisadores homogêneos $\text{MoO}_2\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_2$ e $\text{Zn}(\text{OAc})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ são muito eficientes na despolimerização de resíduos de plástico em compostos de valor acrescentado com bons rendimentos.[2,3] A aplicação de catalisadores heterogêneos na despolimerização redutiva de resíduos de plástico, nomeadamente, poliésteres, nunca foi investigada. Nesta tese de mestrado pretende-se estudar a despolimerização de vários poliésteres promovida por catalisadores heterogêneos. Com este objetivo, inicialmente será sintetizada uma variedade de catalisadores heterogêneos, incluindo materiais MCM-41 funcionalizados e nanopartículas magnéticas contendo complexos de metais baratos e ecológicos como Mo, Zn, Ni e Fe. Estes catalisadores serão, em seguida, testados na despolimerização redutiva de vários poliésteres, tais como, PET, PBT, PLA, PCL, P4HB e PBS. Como agentes redutores serão usados silanos, boranos, entre outros reagentes. Serão ainda estudados outros parâmetros reacionais tais como a quantidade de catalisador e de agente redutor, uso de solventes não tóxicos, temperatura e tempo de reação, reutilização dos catalisadores e reações em grande escala. Após a otimização das condições reacionais, o melhor sistema catalítico será aplicado na despolimerização de objetos de plástico, tais como, garrafas, copos, embalagens, peças de vestuário e material elétrico. A aplicação destes catalisadores heterogêneos certamente irá contribuir para a valorização dos resíduos de plástico em compostos de valor acrescentado, promovendo a economia circular e reduzindo o impacto negativo da poluição dos plásticos no ambiente e na saúde dos seres vivos.</p> <p>Referências: [1] Fernandes, A. C., <i>Green Chem.</i> 2021, <i>23</i>, 7330-7360. [2] Nunes, B. F. S.; Oliveira, M. C.; Fernandes, A. C., <i>Green Chem.</i> 2020, <i>22</i>, 2419. [3] Fernandes, A. C., <i>ChemSusChem</i> 2021, <i>14</i>, 4228-4233.</p>
<p>ORIENTADOR(ES): LOCAL:</p>	<p>Ana Fernandes, anacristinafernandes@tecnico.ulisboa.pt; Carla Nunes (DQB)</p>
<p>11</p>	<p>TÍTULO: Avaliação objetiva da variação no nível de nutrientes no Rio Tejo</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>A gestão dos recursos ambientais envolve a monitorização regular da sua composição química e a avaliação da importância da variação dos parâmetros químicos relevantes. A interpretação da tendência da composição de sistemas ambientais vastos é afetada pela representatividade da sua amostragem que impacta na incerteza da informação recolhida. Uma tendência da composição de um sistema ambiental, como o aumento do nível de nutrientes, só é considerada relevante se a diferença não puder ser atribuída à heterogeneidade do sistema ou à incerteza da sua caracterização. Quando o teor médio de um parâmetro numa área ambiental vasta é determinado com incerteza, estima-se um intervalo que deverá incluir o valor verdadeiro do parâmetro com um nível de confiança conhecido, tipicamente 95% ou 99%. Se estiver disponível o teor médio do parâmetro na mesma área ambiental em duas ocasiões relevantes, é possível determinar qual a probabilidade da variação composicional ser real; i.e. não atribuível à incerteza da caracterização. Este projeto envolve o estudo da variação do nível de nutrientes de uma área do rio Tejo sujeita à pressão agrícola e pecuária recorrendo a ferramentas capazes de provar se a tendência observada é real. O teor de nutrientes será determinado por cromatografia iónica recorrendo a métodos analíticos validados considerando os critérios internacionalmente aceites para a avaliação de métodos e outras ferramentas inovadoras de avaliação fina do desempenho analítico. Será também utilizada uma ferramenta computacional de avaliação da incerteza da amostragem de sistema ambientais vastos. As competências a adquirir pelo aluno têm uma elevada empregabilidade em laboratórios acreditados pelo Instituto Português de Acreditação recorrendo à Norma NP EN ISO/IEC 17025:2018.</p> <p>Referência: C. Borges, R. B. da Silva, C. Palma, Determination of river water composition trends with uncertainty: Seasonal variation of nutrients concentration in Tagus river estuary in the dry 2017 year, <i>Marine Pollution Bulletin</i> 158 (2020) 111371 (DOI 10.1016/j.marpolbul.2020.111371) Página: https://mechem.rd.ciencias.ulisboa.pt/</p>
<p>ORIENTADOR(ES): LOCAL:</p>	<p>Ricardo Silva, rjsilva@ciencias.ulisboa.pt; Cristina Oliveira (DQB)</p>
<p>12</p>	<p>TÍTULO: Desenvolvimento de novos nanomateriais bioativos para a prevenção da bioincrustação em superfícies</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>A colonização espontânea de microorganismos em superfícies, promovendo a formação de biofilmes, são uma preocupação global para todas as infra-estruturas da sociedade, por exemplo, sistemas de gestão de serviços de água (ex., distribuição e tratamento de água). Os biofilmes conduzem a consequências graves, incluindo biocorrosão prematura e biocontaminação transmitidas pela água, representando um risco importante para a sustentabilidade dos sistemas industriais e saúde pública. A desinfecção ou eliminação destes biofilmes é um processo crítico e desafiador. As estratégias de bio-descontaminação mais eficazes incluem a libertação controlada de agentes bioativos, mas estes são tóxicos e acumulam-se no ambiente aquático, consequentemente apresentam um ciclo de vida limitado e problemas ecológicos. Este trabalho visa contribuir para superar estes desafios das estratégias de bio-descontaminação. Pretende-se desenvolver abordagens inovadoras e amigas do ambiente para o suporte de agentes biocidas comerciais e naturais em nano-substratos, permitindo a amplificação da sua bioatividade, particularmente para microrganismos patogénicos e resistentes, tendo-se como objectivo final gerar revestimentos antimicrobianos contendo esses nano-agentes e que minimizem em simultâneo a libertação dos agentes bioativos para o meio aquático, alargando a sua potencial aplicação de acordo com a legislação ambiental.</p>

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

	<p>As principais atividades do plano de trabalho compreendem:</p> <ul style="list-style-type: none"> (i) Desenvolver estratégias para suportar os agentes bioativos em nano-substratos; (ii) Caracterização físico-química dos nano-agentes (por exemplo, XRD, DRIFT, SEM, análise elementar); (iii) Avaliação da susceptibilidade antimicrobiana e da citotoxicidade e ecotoxicidade dos nano-agentes; (iv) Num estágio final, os nano-agentes mais promissores serão incorporados num revestimento comercial para revestir pequenos protótipos para prova de conceito em condições laboratoriais e simuladas, incluindo atividade antimicrobiana, caracterização físico-química e de toxicidade dos revestimentos gerados; (v) Em todo o trabalho inclui-se ainda atividades de divulgação, que pode incluir contribuições e participação em eventos/acções de formação e escrita da tese. <p>Nota: Os estudantes seleccionados para este projeto, após o registo da tese, são elegíveis para se candidatarem ao Programa BioISI Junior (apoiando 8 estudantes com uma Bolsa de Estudo de 6 meses, sendo o critério de selecção o mérito académico dos candidatos).</p>
<p>ORIENTADOR(ES): LOCAL:</p>	<p>Elisabete R. Silva, ersilva@fc.ul.pt; Rita Pacheco (ISEL)</p>
<p>13</p>	<p>TÍTULO: Desenvolvimento de metodologias analíticas inovadoras para controlo de drogas em matrizes biológicas com interesse forense</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>A preparação de amostras desempenha um papel importante e decisivo em Química Analítica (QA), fundamentalmente quando são implementados métodos cromatográficos, espectroscópicos e hifenados e, em particular, se estivermos em presença de matrizes complexas. Em muitos esquemas analíticos, o tempo despendido na preparação da amostra pode exceder mais de 60 % do total envolvido e, as fontes de erro geradas, podem ser superiores a 30 %, particularmente se as metodologias forem desenvolvidas para responder a análise vestigial ou ultra-vestigial. Neste contexto, as inovadoras técnicas baseadas em microextração sortiva, que atendem aos princípios da QA verde, como é o caso da técnica de microextração adsorvente em barra (BAμE), tornam-se relevantes uma vez terem demonstrado serem alternativas efetivas a diversas metodologias convencionais bem estabelecidas.</p> <p><i>Vem Especializar-te em química analítica</i></p> <p>Figura 1. Ciclo analítico usado na implementação da técnica BAμE.</p> <p>A presente proposta de projeto para dissertação visa o desenvolvimento de metodologias inovadoras para preparação de amostra em combinação com cromatografia em fase gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS) e/ou cromatografia líquida de alta eficiência com deteção por rede de díodos (HPLC-DAD) para análise de drogas ou compostos farmacêuticos com impacto em matrizes biológicas (ex. urina) em contexto forense. O presente projeto, no domínio da QA, proporcionará ao estudante a oportunidade para aprender a desenvolver, otimizar e validar metodologias analíticas para determinação vestigial de compostos emergentes, permitindo um contacto prático com tecnologias modernas e instrumentação analítica de topo. Com a formação adquirida o estudante ficará apto para poder integrar posteriormente um qualquer projeto ou posição numa instituição ou empresa que detenha laboratórios de análise química e toxicologia forense ou do controlo da qualidade.</p> <p>[1] N.R. Neng, A.R.M. Silva, J.M.F. Nogueira, J Chromatogr A, 1217 (2010); [2] J.M.F. Nogueira, Anal Chim Acta, 757 (2012); [3] A.H. Ide, J.M.F. Nogueira, Anal and Bioanal Chem, 410 (2018); [4] A.H. Ide, J.M.F. Nogueira, J Pharm and Biomed Anal, 153 (2018).</p>
<p>ORIENTADOR(ES): LOCAL:</p>	<p>Nuno Neng, ndneng@fc.ul.pt</p>
<p>14</p>	<p>TÍTULO: Análise de perfis metabólicos e neurotóxicos de catinonas sintéticas por espetrometria de massa de alta resolução</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>As catinonas sintéticas representam a segunda maior classe de novas substâncias psicoativas (NSP) reportadas em todo o mundo e constituem um sério risco à saúde pública. De fato, o aumento do número de intoxicações agudas e mortes associadas ao consumo destas NSP resultou na sua inclusão contínua na Convenção sobre as Substâncias Psicotrópicas, com base na sua avaliação de risco. No entanto, um dos maiores desafios criados pela rápida disseminação das catinonas no mercado de drogas ilícitas é a falta de biomarcadores seletivos que permitam a sua deteção em matrizes biológicas em contextos forenses e clínicos. A descoberta destes biomarcadores só é possível através do estudo do seu perfil metabólico. Adicionalmente, tendo em conta o aumento do número de eventos neurotóxicos graves induzidos por esta classe de compostos, é urgente a elucidação dos mecanismos subjacentes a estas reações adversas, para o desenvolvimento de medidas terapêuticas adequadas. Com o objetivo final de contribuir para uma resposta proativa na resolução do problema das NSP, e no âmbito de um protocolo estabelecido entre o Laboratório de Polícia Científica da Polícia e a Universidade de Lisboa (Faculdade de Ciências e Instituto Superior Técnico), neste projeto pretende-se: i) determinar, por</p>

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

		espectrometria de massa de alta resolução, o perfil metabólico (resultante de incubações <i>in vitro</i> em microsomas hepáticos e cerebrais humanos) de catinonas, que já foram encontradas no mercado de drogas ilegais ou que se espera que surjam neste mercado num futuro próximo, com base na sua semelhança estrutural com as 156 catinonas já reportadas na Europa; ii) sintetizar os principais metabolitos das catinonas selecionadas; iii) elucidação preliminar dos perfis metabólicos e dos potenciais mecanismos de toxicidade num modelo cerebral.
	ORIENTADOR(ES):	Alexandra Antunes, alexandra.antunes@tecnico.ulisboa.pt ; Helena Gaspar (DQB)
	LOCAL:	  
15	TÍTULO:	Desenvolvimento de metodologias analíticas para a identificação de substâncias controladas em diversas matrizes
	RESUMO:	Desde 2005, uma vasta gama de novas substâncias psicoativas (NSP) tem emergido no mercado de drogas de abuso. Estas substâncias são novos estupefacientes ou psicotrópicos que não fazem parte da lista de substâncias controladas pelas convenções das Nações Unidas. As NSP pretendem mimetizar o efeito de uma droga ilegal, sendo usualmente derivados ou análogos destas substâncias, conseguindo deste modo escapar às restrições legais. A velocidade com que as NSP entram no mercado dificulta uma resposta rápida na sua identificação por parte das entidades competentes. Deste modo, neste projeto, propomos a implementação de uma metodologia analítica que permita a identificação de novas substâncias psicoativas (ou de outras substâncias controladas) em diversas matrizes. O trabalho envolverá as seguintes etapas: i) seleção das substâncias a estudar; ii) sempre que necessário, a obtenção de padrões das substâncias selecionadas por síntese ou purificação de materiais apreendidos; iii) escolha das metodologias adequadas para a sua identificação em produtos apreendidos ou em matrizes para controlo de dopagem; iv) implementação da metodologia selecionada para controlo de dopagem. Este projeto irá ser realizado no âmbito da colaboração com o Laboratório de Polícia Científica da Polícia Judiciária (LPC-PJ) e o Laboratório de análises de dopagem (LAD) e terá a colaboração da Dra. Maria João Caldeira do LPC-PJ e o Dr. João Ruivo do LAD.
	ORIENTADOR(ES):	Helena Gaspar, hmgaspar@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
16	TÍTULO:	Desenvolvimento de pró-farmacos teranósticos de ruténio para a terapia do cancro
	RESUMO:	O cancro é uma das principais causas de morte no mundo. O contínuo aumento da sua incidência e mortalidade é um dos desafios de saúde pública mais importantes deste século. Apesar de décadas de esforços globais, ainda não há cura para o cancro e a taxa de sobrevivência a 5 anos continua baixa devido a diagnósticos tardios e à falta de terapias eficientes/específicas. Este projeto visa explorar essas limitações através do desenvolvimento de agentes teranósticos com dupla ação de diagnóstico precoce e terapia dirigida. A estrutura destes agentes de teranóstica inteligentes explora as diferenças entre as células cancerosas e saudáveis, contendo assim uma unidade de direcionamento e grupos funcionais sensíveis a estímulos tumorais de modo a aumentar a eficácia de diagnóstico e terapêutica através da libertação controlada do fármaco/sonda seletivamente no seu alvo/local de ação. Neste projeto serão desenvolvidos novos conjugados de ruténio-sonda dirigida cuja estrutura tem como base complexos de ruténio que já mostraram ser bastante eficazes <i>in vitro/in vivo</i> contra vários tumores [1,2], conjugados a sondas com afinidade para recetores sobre-expressos nas células cancerosas. Este sistema extremamente específico é inativo durante a entrega, mas quando alcança o alvo o espaçador é clivado e permite a libertação do fármaco de Ru na sua forma ativa e da sonda. O trabalho compreende as seguintes vertentes: i) Síntese e caracterização das sondas orgânicas; ii) Síntese e caracterização dos complexos organometálicos de "RuCp"; iii) Síntese dos agentes teranósticos; iv) Caracterização pelas técnicas espectroscópicas usuais: FT-IR, UV-vis. e RMN. Serão realizadas análises elementares para obter uma garantia da pureza dos compostos. A estrutura cristalina será determinada por difração de raios-X; v) Avaliação das propriedades de imagem das sondas/agentes teranósticos; vi) Avaliação das potencialidades anti-tumorais dos complexos de Ru /agentes teranósticos em linhas celulares tumorais e não-tumorais humanas. [1] Nuno Mendes <i>et al.</i> , <i>AntiCancer Agents in Med. Chem.</i> , 2017, 17(1), 126. [2] Tânia S. Morais, <i>et al.</i> , <i>Fut. Med. Chem.</i> , 2016, 8(5), 527.
	ORIENTADOR(ES):	Jaime Coelho, jacoelho@fc.ul.pt ; Tânia Morais (DQB)
	LOCAL:	 
17	TÍTULO:	Avaliação de compostos orgânicos voláteis em plantas mediterrânicas com importância na flammabilidade e propagação dos incêndios
	RESUMO:	No sentido de avaliar o resultado da acumulação de gases inflamáveis na propagação de incêndios florestais, pretende-se identificar os compostos orgânicos voláteis (VOCs) majoritários emitidos por plantas mediterrânicas (ex., <i>Arbutus unedo</i> L., <i>Phillyrea</i> spp., <i>Quercus coccifera</i> L., etc.). Numa segunda fase, será avaliada a alteração na composição de VOCs emitidos pelas folhas das mesmas espécies aquando expostas a diferentes temperaturas, através da realização de ensaios de combustão. Para a realização da caracterização química dos principais VOCs emitidos pelas folhas dos arbustos, será realizada a recolha de folhas em frascos de amostragem adequados previamente selecionados. Também, proceder-se-á realização de estudos on-site no mesmo sítio de amostragem através de microextração adsorptiva em barra (BA μ E). A identificação dos principais VOCs emitidos pelas folhas será realizado através de microextração em fase sólida (SPME), recorrendo à utilização de fibras à base de PDMS/DVB. As fibras de SPME serão posicionadas no espaço de cabeça (HS) dos frascos contendo as folhas amostradas para realizar a extração e enriquecimento dos VOCs em condições previamente otimizadas. Por outro lado, após a extração passiva on-site por BA μ E, os dispositivos serão sujeitos a microdessorção líquida para a retroextração dos VOCs concentrados. Para ambas as estratégias, a análise será realizada com

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

		recurso a cromatografia em fase gasosa acoplada a espectrometria de massa (GC-MS), o que permitirá a identificação e quantificação dos VOCs com recurso a bibliotecas espectrais de referência e padrões químicos adequados. Ainda, serão realizados estudos preliminares dos gases de combustão resultantes da queima de folhas das espécies em estudo a diferentes temperaturas, por forma a identificar o efeito, quer dos VOCs emitidos quer dos seus produtos de degradação, na propagação de incêndios florestais extremos. Todos os resultados obtidos serão sujeitos a discussão e interpretação pelos diferentes grupos de investigação envolvidos no projeto de investigação para a avaliação das possíveis correlações com ensaios previamente realizados pelas diferentes componentes. Os objetivos delineados no presente plano de trabalho estão incluídos nas tarefas correspondentes à "Milestone 5 - Results of temperature and combustion" do projeto "PCIF/GFC/0078/2018".
	ORIENTADOR(ES):	José Nogueira, nogueira@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
18	TÍTULO:	Eletrossíntese de copolímeros adesivos e condutores
	RESUMO:	<p>A dopamina polimerizada, designada por polidopamina, apresenta uma identidade química que mimetiza aquela exibida pelas proteínas adesivas presentes no mexilhão. Essas características químicas, de adesividade e outras, tornam este material interessantíssimo para diversas aplicações nas áreas dos sensores [1], remediação ambiental ou mesmo no armazenamento e conversão de energia. Infelizmente, apesar das propriedades químicas apelativas, o seu comportamento electroquímico é sofrível, inibindo ou mesmo impedindo os processos de transferência de carga o que, na prática, inviabiliza a sua participação na maior parte das potenciais aplicações que se lhe adivinhavam [2]. Esta limitação pode ser ultrapassada se distribuirmos as funcionalidades características da dopamina no seio de uma matriz verdadeiramente condutora. Conseguimos recentemente nos nossos laboratórios a copolimerização electroquímica do pirrole e da dopamina, com a obtenção de filmes que revelam a identidade do polipirrole e simultaneamente da dopamina. Deste modo, associámos as relevantes propriedades da dopamina à elevada condutividade eléctrica do polipirrole, num material com um potencial a explorar tremendo e que abre a porta a novos campos de aplicação até agora vedados pela baixa condutividade da dita polidopamina. As características deste novo material electrosintetizado ainda estão, na sua maioria, por explorar. Quer a natureza química, as propriedades electroquímicas e óticas, a sua estrutura electrónica, a dependência das suas características químicas e físicas do estado electroquímico em que se encontra, tudo isto é ainda território virgem. Desbravá-lo permitirá propor à comunidade científica um novo e excitante material multiuso. É este o tema do projecto de dissertação: explorar e modular as propriedades físico-químicas deste material preparado por via electroquímica criando conhecimento puro. Para o conseguir recorrer-se-á a técnicas experimentais avançadas, para além das electroquímicas, como sejam a microscopia de força atómica (não só para aceder à simples topografia, mas para uma análise mais profunda como medidas de adesividade), elipsometria in-situ, electrogravimetria e medidas de molhabilidade com controlo de potencial.</p> <p>[1] J.L.C. Almeida, R.D. Correia, G.Squillaci, A. Morana, F.La Cara, J.P. Correia, A.S. Viana, <i>Electrochim. Acta</i> 319 (2019) 462. https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138515</p> <p>[2] L.C. Almeida, R.D. Correia, B.Palys, J.P. Correia, A.S. Viana, <i>Electrochim. Acta</i> (2021) 386 138515. https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138515</p>
	ORIENTADOR(ES):	Jorge Correia, jmcorreia@ciencias.ulisboa.pt ; Ana Viana (DQB)
	LOCAL:	 
19	TÍTULO:	Membrane protein compartments: regulation by sphingolipid hydroxylation
	RESUMO:	<p>Presently, a frightful number of reports concerning fungal infections that no longer respond to available antifungal therapies can be found. Thus, antifungal resistance is an emerging public health problem recognized by the World Health Organization. The master thesis here proposed is based on the discovery made in our lab of a special kind of plasma membrane domains in fungi, the sphingolipid-enriched domains or SLEDs (see reference#1), which are not detected in mammalian membranes. This discovery together with the differences in fungal and mammalian lipidomes led us to hypothesize that the hydroxylation pattern of sphingolipids plays a crucial role in plasma membrane dynamics, and therefore, on the organization and interplay of protein membrane compartments. The goals of this project are: 1) to reveal how sphingolipid hydroxylation patterns impact the two major membrane compartments in yeast plasma membrane, the compartment of the H⁺-ATPase Pma1p, and the compartment of the arginine/H⁺ symporter Can1p; 2) to disclose the intricate relation between membrane protein organization and lipid domains in fungi. Moreover, given the paramount physiological roles of Pma1p, namely in maintaining pH and ionic balance and in energetic metabolism, this work will also shed new light on eukaryotic cell physiology. The project will involve microbiological techniques (yeast growth and transformation with fluorescent proteins), biochemical methods (plasma membrane isolation by ultra-centrifugation, membrane reconstitution) and biophysical approaches (fluorescence spectroscopy, including fluorescence anisotropy and lifetimes, confocal microscopy and FLIM (fluorescence lifetime imaging microscopy)). For an example, see reference#2. This work is expected to generate a comprehensive picture of how sphingolipid structure may impact and determine fungi plasma membrane organization as well as its role on cell physiology. If selected, the student will be granted a scholarship with a monthly allowance of €875,98 for 6 months, with possibility of extension, in the framework of an FCT funded project (EXPL/BIA-BFS/1034/2021). This work will be carried out at the <i>Molecular Biophysics Lab</i>, Centro de Química Estrutural, C8, Piso 4, FCUL (bmn.cqb.fc.ul.pt).</p> <p>[1] Santos FC, Marquês JT, Bento-Oliveira A and de Almeida R.F.M. Sphingolipid-enriched domain in fungi. <i>FEBS Lett.</i> 2020, 594, 3698.</p> <p>[2] Bento-Oliveira, A et al. Yeast Sphingolipid-Enriched Domains and Membrane Compartments in the Absence of Mannosyldiinositolphosphorylceramide. <i>Biomolecules</i> 2020, 10, 871. [3] F.C. Santos et al. 2020, <i>FEBS Letters</i>, 594, 3698-3718.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Joaquim Marquês, jmtmarques@fc.ul.pt ; Rodrigo Almeida (DQB)
	LOCAL:	 
20	TÍTULO:	Estudo do perfil de macronutrientes em espécies vegetais regadas com águas residuais tratadas



LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

RESUMO:	<p>A grande utilização de água potável a nível mundial é na irrigação das culturas em sistemas agrícolas. Efetivamente, os sistemas de rega são responsáveis pelo consumo de cerca de 70% a 80% da água potável consumida. Os usos industriais e o consumo humano representam o restante consumo com a água utilizada no consumo humano a representar apenas cerca de 5% do total. Noutra prisma, o aquecimento global tem estendido as zonas desérticas para zonas antes férteis. Em Portugal este problema é particularmente acentuado no sul do país com o omnipresente estado de seca no Alentejo e Algarve. Importa assim procurar fontes alternativas de água para a irrigação cada vez mais necessária nestas zonas. Uma das soluções para a diminuição do consumo de água potável na agricultura será a utilização na rega de águas residuais tratadas (ART). Esta solução apresenta a vantagem de completar a utilização circular da água, poupando recursos e diminuindo o impacto no ambiente. No meio urbano é particularmente importante a utilização de ART pois é ali que têm origem grande quantidade dessas águas. A sua utilização, por exemplo em hortas urbanas, pouparia o seu transporte até à zona de descarga, habitualmente no mar ou rios próximos. Com a utilização de águas residuais em irrigação de zonas de cultura, diminuem-se os impactos nos meios hídricos (rios e oceanos) pela diminuição da descarga destas águas e poupa-se também em fertilizantes dado que elas contêm muitos nutrientes essenciais ao desenvolvimento das culturas. No ISEL desenvolve-se atualmente um projeto em que se estuda a utilização controlada de águas residuais tratadas em culturas típicas das hortas urbanas: couve-galega, alface frisada, cebola e cenoura. Estudam-se os efeitos dos metais pesados nas culturas avaliando a possível absorção destes pelas diversas espécies vegetais. Com este trabalho pretende-se estudar um aspeto complementar, o impacto dos níveis de macronutrientes presentes nas águas e o seu correspondente nível nas plantas. Pretende-se avaliar as concentrações de diversos iões nas águas de rega, a sua retenção pelos solos e posterior absorção pelas plantas em estudo. Serão recolhidas amostras de águas residuais tratadas de diversas Estações de Tratamento de Águas Residuais (ETAR) de Lisboa, serão recolhidas amostras de solo regado com cada uma das águas residuais tratadas e amostras de cada uma das espécies cultivadas. Através de extração acelerada por ultrassons seguida de cromatografia iónica serão quantificados os níveis dos iões sódio, potássio, amónio, cálcio e magnésio bem como cloreto, nitrito, brometo, nitrato, fosfato e sulfato. Serão correlacionados os teores de iões em cada um dos compartimentos ambientais e será também registado o nível de crescimento relativo das espécies cultivadas. Poderemos assim, no futuro, escolher para rega as águas residuais tratadas que, não representado perigo para a saúde pública, possam maximizar o crescimento das culturas.</p>	
ORIENTADOR(ES):	Cristina Oliveira, cmoliveira@ciencias.ulisboa.pt ; Manuel Matos (ISEL)	
LOCAL:		
21	TÍTULO:	Investigação estrutural e funcional de quinona reductases de bactérias patogénicas
RESUMO:	<p>Aquisição de energia é a base da vida. Todos os organismos precisam adquirir energia do ambiente e convertê-la em formas úteis para a sua manutenção, crescimento e reprodução. É assim surpreendente que o metabolismo energético de muitos patógenos ainda seja totalmente conhecido. Este trabalho incide sobre o estudo de enzimas envolvidas no metabolismo energético de <i>Staphylococcus aureus</i> e de <i>Pseudomonas aeruginosa</i>, dois patógenos humanos oportunistas considerados pela Organização Mundial de Saúde umas das bactérias multirresistentes a antibióticos mais críticas. Ambas as bactérias apresentam grande capacidade de adaptação a diversas condições ambientais, principalmente durante a colonização do hospedeiro, o que as torna excecionais patógenos oportunistas. A adaptabilidade desses patógenos vem de sua versatilidade metabólica, que em parte se deve à composição relativamente complexa das suas cadeias respiratórias, especificamente no que diz respeito as quinonas reductases. Dada a sua relevância no metabolismo energético, estas enzimas são considerados possíveis alvos no design de drogas.</p> <p>Objetivo: O projeto visa investigar quinonas reductases de <i>S. aureus</i> e <i>P. aeruginosa</i>. É nosso objetivo compreender o papel destas enzimas no metabolismo energético e elucidar as suas respetivas relações estrutura / função.</p> <p>Plano de trabalho: Neste projeto, o estudante de Mestrado entrará em contato com metodologias de bioquímica e biofísica, especificamente o plano de trabalhos inclui três tarefas: 1) Preparação dos sistemas de estudo e caracterização bioquímica e espectroscópica, 2) Caracterização enzimática e determinação de parâmetros cinéticos, como Km e Vmax e 3) Análise da interação proteína-substrato e proteína-inibidor. O estudante selecionado para este trabalho poderá candidatar-se a uma bolsa de iniciação à investigação no âmbito do BioISI ou no do projeto PTDC/BIA-BQM/2599/2021 - Exploring respiratory proteins from human bacterial pathogens.</p>	
ORIENTADOR(ES):	Manuela Pereira, mmpereira@fc.ul.pt	
LOCAL:		
22	TÍTULO:	Engenharia de cristais: Competição entre ligações de halogénio e ligações de hidrogénio na formação de co-cristais
RESUMO:	<p>Apesar das ligações de halogénio serem conhecidas desde o século XIX, a sua verdadeira identidade só começou a ser compreendida no início deste século. A utilização de estratégias de engenharia de cristais baseadas em ligações de halogénio para criar materiais com empacotamentos cristalinos capazes de favorecer funções específicas é bastante recente. Uma dessas estratégias envolve a co-cristalização. Os co-cristais são compostos que incorporam na mesma rede cristalina duas ou mais moléculas diferentes (os chamados co-formadores). Este facto confere-lhes propriedades únicas, que podem ser úteis, por exemplo, na formulação de medicamentos, agroquímicos ou compostos energéticos. Compostos doadores de ligações de halogénio têm sido frequentemente utilizados como co-formadores. Mas, o efeito da competição entre este tipo de interação e outras interações direcionais como as ligações de hidrogénio na organização das moléculas numa rede cristalina está muito pouco explorado. O presente projeto tem por objetivo explorar essa competição de um ponto de vista estrutural e energético. Serão para isso sintetizados co-cristais, utilizando fenóis halogenados (doadores tanto de ligações de halogénio como de hidrogénio), e compostos aceitadores de ligações de halogénio e hidrogénio, como a pirazina. A síntese será baseada em mecanoquímica e/ou cristalização a partir de solução. A caracterização estrutural dos produtos será efetuada por difração de Raios-X e espectroscopia de infravermelhos. O estudo energético será baseado em técnicas calorimétricas e medidas de solubilidade. Serão também estudados os processos de agregação molecular que conduzem à formação dos co-cristais a partir de em solução utilizando, primordialmente, medidas da densidade e/ou velocidade do som, em função da concentração.</p>	
ORIENTADOR(ES):	Maria Santos, mssantos@fc.ul.pt ; Manuel Piedade (DQB)	
LOCAL:		

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

23	TÍTULO:	Development of deep eutectic solvent models for the simulation of biological systems
	RESUMO:	<p>Deep eutectic solvents (DES) are a relatively new class of green solvents, liquid at room temperature, which are characterized by a depression of the melting point relative to its components at a specific composition. DES have a large spectrum of potential applications as green solvents, sharing many of the general characteristics of ionic liquids, such as a low vapor pressure and high thermal stability, although exhibiting several advantages, noteworthy, ease of preparation, reduced cost, and biodegradability. Most DES are binary mixtures of a quaternary ammonium salt, typically choline chloride, and a hydrogen bond donor such as urea. The fact that the addition of water allows further tailoring the solvent properties raises the possibility of using DES in a plethora of biological applications including the conservation of biomacromolecules, drug delivery, or enzymatic catalysis. However, the behavior of biological molecules in DES and the role of water remains poorly understood. Molecular dynamics simulations can provide molecular insight into the structure and dynamics of these macromolecules in DES and hydrated DES. These simulations are, however, as accurate as the accuracy of the force fields used to describe the solvent-biomacromolecule interactions. This project main goal is two-fold: the development of force fields to simulate specific DES, and the study of the structure of proteins in these DES through molecular dynamics simulations. Structural as well as dynamic properties such as diffusion and viscosity will be studied to develop and validate the force fields for the DES. Next the secondary and tertiary structures of specific proteins will be assessed in the DES of interest. Further, the effect of hydration in the structure and function of the proteins will be assessed.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Nuno Galamba, njgalamba@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
24	TÍTULO:	Síntese de novos compostos análogos a nucleós(t)idos com potencial interesse antibacteriano e anticancerígeno
	RESUMO:	<p>Os nucleós(t)idos sintéticos e compostos análogos/miméticos destes têm grande relevância em Química Medicinal devido à sua capacidade de exibir uma variedade de atividades biológicas com interesse terapêutico. Várias moléculas destes grupos são usadas como fármacos para o tratamento do cancro ou doenças virais [1]. A atividade desses compostos advém da sua aptidão para mimetizar os nucleótidos naturais e inibir/bloquear a síntese dos ácidos nucleicos, conduzindo à apoptose celular ou à interrupção do ciclo de replicação viral [1]. Vários estudos têm também reportado o seu potencial antimicrobiano [2,3]. Neste contexto, o objetivo deste trabalho é a síntese de novos compostos baseados em nucleósidos com potencial para mimetizar nucleósidos difosfato e açúcares de nucleósidos difosfato, os quais serão posteriormente avaliados pelas suas atividades biológicas, nomeadamente anticancerígenas e antibacterianas, através de colaborações científicas já estabelecidas. A estrutura das moléculas incluirá um sistema sulfoacetato como uma unidade alternativa e potencialmente mimética do sistema difosfato. A estratégia de síntese envolverá a preparação de nucleósidos contendo um grupo hidroxilo livre em C-5 ou C-6, a sua conversão em derivados 5'-/6'-sulfonilacetato e o acoplamento destes a glicósidos de metilo parcialmente protegidos. A configuração e o padrão de substituição das unidades monossacarídicas serão variados bem como a natureza da base azotada do nucleósido (derivados de purina ou pirimidina). A caracterização estrutural dos compostos será realizada por métodos espectroscópicos, nomeadamente técnicas mono- e bidimensionais de RMN, e por métodos físicos, tais como a medição do ponto de fusão e do poder rotatório, quando apropriado. Este trabalho pretende contribuir para o desenvolvimento de moléculas de estrutura inovadora com potencial terapêutico.</p> <p>Referências: [1] L. P. Jordheim et al. Nat. Rev. Drug Discovery 2013, 12, 447. [2] J. M. Thomson et al. Microbiol. 2019, 10, 952. [3] M. Serpi, V. Ferrari, F. Pertusati, J. Med. Chem. 2016, 59, 10343.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Nuno Xavier, nmxavier@ciencias.ulisboa.pt
	LOCAL:	 
25	TÍTULO:	What drives the membrane permeability of drugs? A study on untackled effects
	RESUMO:	<p>In <i>medicinal chemistry</i> and <i>pharmaceutical sciences</i>, a prior knowledge of membrane permeability is crucial to identify and discard the less permeable, hence, poor drug candidates. Several factors affect membrane permeability of drugs, including the size, charge, pH, and the presence of specific chemical groups that allow the formation of noncovalent interactions such as hydrogen or halogen bonds [1]. Therefore, the understanding, at the molecular level, of the interplay between these factors is paramount for <i>drug design</i>. In this scope, fast, accurate but cheap <i>computational methods</i> are the tool of excellence and our laboratories have been at the forefront of this research area. Indeed, Machuqueiro's Lab has been studying and developing methods <i>to tackle pH</i> effects on membrane permeability [2], whereas Costa's Lab provided, for the first time, evidence for the existence of <i>halogen-membrane</i> recognition phenomena with a possible effect on the permeation of halogenated drug-like molecules [3]. Building on the previous knowledge of both Labs, this project aims to study the interaction of several small drug-like molecules with a membrane model at the molecular level, using computational methods, to rationalize the effect of protonation/deprotonation events of titrable groups and of the establishment of noncovalent interactions (hydrogen or halogen bonds) in membrane permeability. By initially using small prototype systems to decrease the complexity of the process, we ultimately aim to understand how the presence of both halogens and Lewis base groups affect and contribute to the permeability (or lack thereof) of drugs such as Cobimetinib (Fig 1), an anti-cancer medication to treat patients with melanoma. In the end, we will compile the results in a <i>master thesis</i> and <i>prepare a manuscript</i> submission to an international scientific journal. Students selected for this project, after thesis registration, <i>are eligible to apply to the BioISI Junior Programme which supports 8 students with a 6-month Scholarship (BII)</i>, being the selection criterion, the academic merit of the candidates.</p>

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

		<p>g. 1. Chemical structure of Cobimetinib highlighting the presence of both halogens and titrable groups.</p> <p>References</p> <p>[1] Costa, P. J. The halogen bond: Nature and applications. <i>Physical Sciences Reviews</i>, 2017, 2, 20170136</p> <p>[2] Stark, M., Silva, T.F.D., Levin, G., Machuqueiro, M., Assaraf, Y.G. The Lysosomotropic Activity of Hydrophobic Weak Base Drugs is Mediated via Their Intercalation into the Lysosomal Membrane. <i>Cells</i>, 2020, 9, 1082.</p> <p>[3] Nunes, R. S.; Vila-Viçosa, D.; Costa, P. J. Halogen Bonding: An Underestimated Player in Membrane-Ligand Interactions, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2021, 143, 4253–4267</p>
	ORIENTADOR(ES):	Paulo Costa, pjcosta@ciencias.ulisboa.pt ; Miguel Machuqueiro (DQB)
	LOCAL:	
26	TÍTULO:	Cristais saltitantes de spin lábil termo e foto-sensíveis
	RESUMO:	<p>Os objetivos propostos neste trabalho são:</p> <p>Síntese e caracterização de ligandos orgânicos com grupos termo-sensíveis.</p> <p>Síntese e caracterização de ligandos orgânicos com grupos foto-sensíveis.</p> <p>Síntese e caracterização de compostos de coordenação de Fe(III) com os ligandos sintetizados nos pontos anteriores.</p> <p>Verificação da aplicação dos compostos como cristais saltitantes usando temperatura e luz.</p> <p>A necessidade de produzir dispositivos de informação com dimensões cada vez mais reduzidas tem atraído um grande número de grupos de investigação de toda a Europa. Investigadores têm combinado esforços para produzir materiais que armazenem informação ao nível molecular aumentando, de forma dramática, a capacidade de armazenamento de informação. Para o efeito, vários materiais baseados em compostos de coordenação com propriedades de transição de spin têm sido reportados.</p> <p>Neste sentido, pretende-se preparar materiais com compostos de coordenação de Fe(III) que possuem a propriedade de transição de spin combinada com os efeitos foto- e termo-saliente. Será efectuada a caracterização dos ligandos orgânicos e dos complexos, usando as técnicas apropriadas a cada tipo de composto (análise elementar, espectroscopia de infra-vermelhos e UV-visível, ressonância magnética nuclear, difracção de raios-X, TEM, SEM, etc).</p>
	ORIENTADOR(ES):	Paulo Martinho, pnmartinho@fc.ul.pt ; Marcos Bento (DQB)
	LOCAL:	
27	TÍTULO:	Evaluation of the molecular interactions and the mode of action of antifungal drugs in membrane model systems
	RESUMO:	<p>In this project, by applying a biomimetic approach it will be possible to understand the behaviour of systems as complex as cell membranes through the chemical-physical study of binary and ternary experimental models [1]. The molecular detail obtained with these models also allows to clarify the mode of action of drugs [2]. The increase in mortality from fungal infections in immunosuppressed patients (e.g., with acquired immunodeficiency or undergoing chemotherapy) reaches alarming rates. The molecular mechanisms of action of many antifungal agents involve the cell membrane of the infectious agent. The membrane components that dictate the life-or-death responses of cells, whether in fungi or humans, are the sphingolipids. Thus, the study of the structure-function relationship in sphingolipids is an extremely active field of research. The project will focus on the structural differences between the sphingolipids of fungi and human cells, aiming at understanding their influence on the structure of the cell membrane and on the mode of action of new antifungal agents. Binary and ternary model membranes containing sphingolipids differing in their hydroxylation profile will be characterized to disclose the importance of sphingolipid hydroxylation pattern in the formation and stability of membrane lipid domains. The characterization will be performed using complementary biophysical approaches, namely fluorescence spectroscopic techniques, complemented with e.g. fluorescence microscopy, compressibility and surface potential of monolayers at the air/water interface or X-ray scattering. Additionally, using membrane model systems carefully selected from the initial experiments, the mutual influence of membrane biophysical properties on the mechanism of action of antifungals and the effect of antifungals on membrane properties will be studied.</p> <p>This project will allow the student to deepen their knowledge on Biochemistry and develop skills in approaches used in the pharmaceutical industry in the pre-clinical evaluation of drugs. If selected, the student will be granted a scholarship with a monthly allowance of €875,98 for 6 months, with possibility of extension, in the framework of an FCT funded project (EXPL/BIA-BFS/1034/2021). This work will be carried out at the <i>Molecular Biophysics Lab</i>, Centro de Química Estrutural, C8, Piso 4, FCUL (bmn.cqb.fc.ul.pt).</p> <p>[1] J. Marquês et al. 2015, <i>Langmuir</i>, 31, 9410-9421.</p> <p>[2] A. Santos et al. 2017, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 19, 30078-30088.</p> <p>[3] F.C. Santos et al. 2020, <i>FEBS Letters</i>, 594, 3698-3718.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Rodrigo Almeida, rfalmeida@fc.ul.pt ; Joaquim Marquês (DQB)
	LOCAL:	
28	TÍTULO:	Do amoníaco ao hidrogénio com estruturas supramoleculares

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

RESUMO:	<p>O hidrogénio tem sido apontado como uma das soluções para responder à crise climática e energética vivida nos dias de hoje. Contudo, o seu armazenamento e transporte continuam a ser um desafio, devido a questões de segurança e do elevado custo associado à liquefação do hidrogénio. O amoníaco surge como uma alternativa verde para a obtenção de hidrogénio, pois trata-se de um químico não inflamável, com uma tecnologia de transporte e armazenamento bem conhecida na indústria. Neste projeto, serão preparados filmes baseados em estruturas metalo-orgânicas (do inglês MOFs) para a obtenção do hidrogénio a partir do amoníaco.</p> <p><u>Objetivos:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - Síntese de filmes baseados em MOFs através de dois métodos diferentes: método direto (eletroquímico) e indireto (síntese solvotérmica, seguida da imobilização da MOF). - Caracterização dos materiais obtidos através de difração de raios-X, espectroscopia de infravermelho, espectroscopia de fotoelétrão-X e microscopia eletrónica de varrimento. - Aplicação dos materiais na eletrocatalise de amoníaco a hidrogénio. Quantificação do hidrogénio formado através de cromatografia gasosa. 	
ORIENTADOR(ES):	Sara Realista, smrealista@fc.ul.pt ; Maria Jorge (DQB)	
LOCAL:		
29	TÍTULO:	Novos nanomateriais para a remoção sustentável de metais tóxicos e medicamentos antivirais das águas residuais
RESUMO:	<p>As alterações climáticas e a degradação ambiental são duas questões dramáticas que ameaçam a sustentabilidade da humanidade. Na Agenda 2030, das Nações Unidas, são propostas diversas ações e estratégias ambiciosas destinadas a preservar a biodiversidade em lagos, rios e zonas húmidas e a reduzir a poluição provocada por micro-plásticos e produtos farmacêuticos. Neste contexto, a procura de novos materiais, com desempenhos melhorados para o controlo da poluição ambiental é um tópico de extrema relevância. O trabalho proposto neste projeto está em linha com esta preocupação, propondo uma metodologia inovadora e com base em princípios de economia circular e sustentável, para mitigar este problema: síntese de novos fotocatalisadores modificados usando metais pesados provenientes de águas residuais contaminadas. Estes novos materiais serão posteriormente utilizados para remoção, por fotodegradação, de uma outra classe de poluentes emergentes com um impacto significativo na sociedade atual, os anti(retro)virais. O plano de trabalho inclui:</p> <ul style="list-style-type: none"> - caracterização das águas residuais fornecidas pela Carmona, S.A. (empresa de gestão e tratamento de resíduos); - síntese dos nanomateriais semicondutores modificados/dopados, incluindo nanopartículas de ZnO e de TiO₂ e nanotubos de titanatos, usando as águas contaminadas; - caracterização dos catalisadores por diversas técnicas espectroscópicas (incluindo UV-vis, DRS, FTIR e XPS) e microscópicas, nomeadamente SEM e TEM; - aplicação em ensaios de remoção por fotocatalise de compostos anti(retro)virais, nomeadamente Ritonavir, Aciclovir e Oseltamivir (Tamiflu), amplamente usados para o tratamento do vírus HIV, herpes e influenza. <p>Todo o trabalho proposto será conduzido tendo como objetivo final conseguir-se um processo simultâneo de remoção de metais pesados e poluentes emergentes de águas residuais, usando o sol como fonte de radiação.</p>	
ORIENTADOR(ES):	Virgínia Ferreira, vcferreira@ciencias.ulisboa.pt ; Olinda C. Monteiro (DQB)	
LOCAL:		
30	TÍTULO:	Desenvolvimento de sistemas inteligentes de metalofármacos de ruténio para a terapia seletiva do cancro da mama metastático
RESUMO:	<p>O cancro da mama é uma das principais causas de morte nas mulheres no mundo, com uma incidência de 25% do total de casos de cancro, surgindo um novo caso a cada 20 s e uma morte a cada 50 s. Embora seja tratável quando diagnosticado precocemente, o cancro da mama avançado ou metastático é incurável devido à falta de uma terapia eficaz. As estratégias para o controlar são focadas em tratamentos convencionais - radioterapia e quimioterapia - que apresentam um baixo índice terapêutico e efeitos secundários graves. Este projeto tem como principal objetivo ultrapassar essas limitações através do desenvolvimento de sistemas inteligentes de entrega de metalofármacos de ruténio seletivamente aos tumores. A estrutura destes sistemas foca-se nas diferenças entre as células cancerosas e saudáveis para introduzir grupos funcionais sensíveis a uma variedade de estímulos celulares, de modo a conseguir uma otimização da eficiência terapêutica do fármaco através da sua libertação controlada e entrega mais eficiente ao alvo. As células cancerosas sobre-expressam recetores específicos de péptidos, comparativamente com os tecidos saudáveis das quais derivam. Neste projeto, serão desenvolvidos novos conjugados de ruténio-péptido (RuPCs) cuja estrutura tem como base complexos organometálicos de ruténio que já mostraram ser bastante eficazes contra tumores da mama (<i>in vitro</i> e <i>in vivo</i>)[1-3]. A estes complexos serão acoplados péptidos que se reconhecem seletivamente os recetores das células de cancro, constituindo assim um modo de transporte privilegiado para a entrega seletiva dos fármacos de ruténio aos alvos sem afetar os tecidos saudáveis.</p> <p>O trabalho compreende as seguintes vertentes:</p> <ol style="list-style-type: none"> Síntese de novos complexos organometálicos de "RuCp"; Caracterização dos complexos pelas técnicas espectroscópicas usuais: FT-IR, UV-vis. e RMN. Serão realizadas análises elementares de %C, H%, N%, S%, etc. para obter uma garantia da pureza dos compostos. A estrutura cristalina será determinada por difração de raios-X; Síntese dos péptidos e dos RuPCs; Os péptidos e os RuPCs serão purificados e caracterizados por HPLC semi-preparativo, HPLC analítico e ESI-MS; Avaliação das potencialidades anti-tumorais dos novos RuPCs em linhas celulares tumorais e não-tumorais da mama humanas. <p>[1] Nuno Mendes <i>et al.</i>, <i>AntiCancer Agents in Med. Chem.</i>, 2017, 17(1), 126; [2] Tânia S. Morais, <i>et al.</i>, <i>Fut. Med. Chem.</i>, 2016, 8(5), 527; [3] João Franco Machado <i>et al.</i>, <i>Dalton Trans.</i> 2020, 49, 5974.</p>	
	Tânia Morais, tsmorais@ciencias.ulisboa.pt	

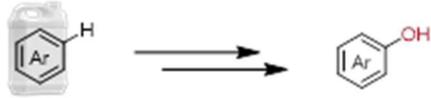
LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

ORIENTADOR(ES):			
LOCAL:			
31	TÍTULO:	Materiais porosos de baixo custo para a separação CO₂/CH₄	
	RESUMO:	<p>O Biogás, em particular o que se forma nos aterros sanitários, é composto por uma mistura de gases em que os maiores componentes são o metano (45 a 60 %) e o dióxido de carbono (40 a 55%). O efeito de estufa do CO₂ e do CH₄ está bem documentado na literatura, sendo que o impacto do CH₄ é cerca de 25 vezes superior ao do CO₂. Em alguns países, os aterros sanitários são mesmo a maior fonte de emissões de metano. Neste sentido, a purificação dos gases que se libertam nos aterros sanitários para re-utilização do metano como fonte de energia é a melhor alternativa à sua emissão direta para a atmosfera ou simples queima. Acontecimentos recentes também reforçaram a importância do aproveitamento mais local de fontes de energia. A separação do metano de uma mistura CO₂ / CH₄ pode ser feita de forma eficiente por processos de adsorção, no caso de ser empregue um adsorvente (um material poroso) de baixo custo. Neste projeto, propõe-se o desenvolvimento de materiais porosos de baixo custo, nomeadamente a partir de argilas naturais, para a separação CO₂ / CH₄. A novidade deste tema em relação a trabalhos que já foram desenvolvidos anteriormente neste âmbito é que o objetivo é reduzir ao máximo as etapas de purificação das argilas de partida, por forma a que a preparação dos materiais seja de baixo custo. Os materiais serão caracterizados por DRX, adsorção de azoto a -196 °C. O objetivo é desenvolver materiais porosos com áreas específicas entre 100 e 200 m²g⁻¹. Nos materiais mais promissores serão determinadas as isotérmicas de adsorção de CO₂ e de CH₄ a 25 °C e para pressões até 6 bar. De acordo com a literatura, quando uma argila purificada é usada para obter materiais porosos, a capacidade de adsorção de CO₂ é de cerca de 1 mmolg⁻¹ pelo que, conseguindo cerca de 70% deste valor usando uma argila não purificada será já um objetivo relevante. Será também efetuada a modelação dos dados de adsorção de CO₂ e de CH₄ para a obtenção de parâmetros que caracterizam o processo de adsorção, nomeadamente a seletividade do adsorvente, ou seja, a eficiência do material para separar o metano de uma mistura CO₂ / CH₄.</p>	
ORIENTADOR(ES):		João Pires, jpsilva@fc.ul.pt	
LOCAL:			
32	TÍTULO:	Exploração computacional de intermediários na redução do dióxido de carbono por complexos dinucleares de Co(II)	
	RESUMO:	<p>A aplicação de complexos dinucleares de Co(II) com aza-criptandos na sequestração e activação de CO₂ por via de foto-redução têm sido alvo de investigação nos últimos anos [1],[2]. No entanto o mecanismo de acção destes complexos durante a catálise ainda não é compreendido. Propõe-se por isso uma exploração computacional usando metodologias da teoria do funcional de densidade para obter estimativas de potenciais de redução padrão de aductos de bicarbonato, e outros intermediários destes complexos de modo a poder compreender as melhores maneiras de otimizar este catalisador e quais as espécies chave que intervêm na sequência de reduções sucessivas. O mestrando aprenderá sobre o estado da arte da química computacional e a usar métodos e conceitos de estrutura electrónica para triar espécies candidatas. Conhecimentos prévios de química inorgânica serão valorizados nas candidaturas. Haverá parceiros experimentais que ajudarão a confirmar a presença de espécies propostas e/ou dos parâmetros calculados. Esta tese estará associada a uma bolsa de mestrado remunerada pelo projecto CO₂Pilot (PTDC/QUI-QIN/0252/2021) e cujo anúncio será iminente.</p>	
ORIENTADOR(ES):		Nuno Bandeira, nuno.bandeira@ciencias.ulisboa.pt ; Paulo Martinho (DQB)	
LOCAL:			
33	TÍTULO:	Avaliação detalhada da incerteza da medição de nutrientes no meio marinho	
	RESUMO:	<p>O Laboratório de Química e Poluição do Meio Marinho do Instituto Hidrográfico (IH-LQPM) da Marinha Portuguesa, tem mais de cinquenta anos de experiência na monitorização do meio aquático. O IH-LQPM é acreditado pelo Instituto Português de Acreditação para a medição de diversos contaminantes e outros parâmetros no meio aquático desde 2011. Mais recentemente, atua como Instituto Designado de Metrologia para a determinação de alguns parâmetros no meio marinho. A função de Instituto Designado de Metrologia requer a produção de medições da mais alta qualidade metrológica que envolve avaliações "bottom-up" da incerteza da medição. Este projeto envolve o desenvolvimento de modelos detalhados da incerteza da medição de nutrientes, por espectrometria de absorção molecular com fluxo segmentado, em águas salobras ou salgadas [1,2]. Esta avaliação deverá recorrer à combinação de componentes de incerteza pelo Método Monte Carlo e à utilização de modelos de regressão não lineares na calibração do espectrómetro. Paralelamente, serão realizadas avaliações "top-down" da incerteza da medição para comparação com os estudos mais detalhados da qualidade da medição. Serão propostas formas de otimização da incerteza da medição com vista ao cumprimento dos mais exigentes critérios de qualidade para produção de Materiais de Referência Certificados [3].</p> <p>Referências:</p> <ol style="list-style-type: none"> Carla Palma, Vanessa Morgado, Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Top-down evaluation of matrix effects uncertainty, Talanta 192 (2018) 278-287 Carlos Borges, Carla Palma, Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Optimization of river sampling: application to nutrients distribution in Tagus river estuary, Analytical Chemistry 91 (2019) 5698-5705 Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Alex Williams (Eds.), Eurachem/CITAC Guide: Setting and Using Target Uncertainty in Chemical Measurement, Eurachem, 2015 	
ORIENTADOR(ES):		Carla Palma, Carla.Palma@hidrografico.pt	
LOCAL:			Instituto Hidrográfico

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

34	TÍTULO:	COPa: Estudo clínico de análise de perfis de compostos orgânicos voláteis no ar exalado da respiração e na urina para diagnóstico e seguimento de doentes com cancro de Pâncreas	
	RESUMO:	<p>O adenocarcinoma do pâncreas é, actualmente, o décimo primeiro tumor mais comum. É a quarta causa de morte por cancro na população ocidental, estimando-se que possa ser a segunda causa de morte em 2030 [1]. A maioria dos casos é diagnosticada em fases avançadas, sendo a probabilidade de sobrevivência aos 5 anos inferior a 10%, em contrarcorrente com outros tumores, um agravamento do prognóstico. Tumores com dimensões inferiores a 1 cm têm sobrevivências de 100% aos 5 anos. O diagnóstico tardio ocorre pela habitual ausência de sintomas em estádios precoces, juntando-se a dificuldade do diagnóstico precoce agravada pela falta de testes com alta sensibilidade e a baixa incidência desta patologia na população em geral. Neste contexto, a capacidade da sua detecção precoce é de potencial grande impacto na melhoria da sobrevivência destes doentes. Todas as células cancerígenas são caracterizadas por uma alteração no seu metabolismo relacionada com o seu crescimento descontrolado. Como tal, a detecção dos metabolitos resultantes dessa actividade metabólica (reflectindo directamente o estado actual de células, tecidos e do microbioma) será uma nova ferramenta de diagnóstico para o cancro do pulmão em fase inicial. Muitos desses metabolitos são compostos orgânicos voláteis, (VOCs) sendo exalados pelo ar expirado no processo da respiração [1]. A análise do perfil dos VOCs exalados (contendo 1000+ VOCs) sugere diferenças entre pacientes com cancro de pâncreas e controlos saudáveis. Este estudo tem como objectivos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • identificação de um perfil de VOCs presentes no ar exalado e na urina de doentes com diagnóstico de adenocarcinoma do pâncreas • aplicação do perfil de VOCs como ferramenta de avaliação da resposta a terapêuticas instituídas. • classificar alguns compostos como biomarcadores para detecção e rastreio precoce de doenças, e na avaliação de resposta a terapêuticas em curso em doentes já diagnosticados. <p>De acordo com os resultados obtidos pretende-se no futuro utilizar os perfis de VOCs identificados em estudos subsequentes para:</p> <ul style="list-style-type: none"> • aplicação em doentes de risco elevado de desenvolver adenocarcinoma de pâncreas desta ferramenta para complemento no diagnóstico precoce da patologia oncológica. • validação em doentes sob tratamento com quimioterapia para adenocarcinoma de pâncreas desta ferramenta como avaliador de resposta ao tratamento. <p>Esta proposta de dissertação insere-se num ensaio clínico devidamente aprovado pela Comissão de Ética da Fundação Champalimaud de investigação clínica translacional, envolvendo a recolha e análise de amostras humanas.</p> <p>Bibliografia [1] Cruz, J., Raimundo, B., Vaz, P. D., (2021) <i>Diagnóstico precoce do cancro do pulmão com a respiração</i>, Rev. Ciência Elem., V9(2):034</p>	
	ORIENTADOR(ES):	Pedro Vaz, pedro.vaz@fundacaochampalimaud.pt	
	LOCAL:	 Champalimaud Foundation	Fundação Champalimaud
35	TÍTULO:	Cheminformatics to speed-up thermal hazards screening of active pharmaceutical ingredients	
	RESUMO:	<p>A Cipan é uma produtora de ingredientes farmacêuticos ativos (API) com grande foco na produção de antibióticos por fermentação e síntese química. Mais recentemente, a Cipan tem vindo a desenvolver-se enquanto CDMO (contract development and manufacturing organization). Deste modo, a Cipan tem em carteira vários projetos próprios e de clientes para desenvolvimento e produção de API para diferentes áreas de aplicação. Enquanto CDMO, o desenvolvimento de processos fermentativos, químicos e métodos analíticos são de vital importância. É também fundamental uma grande flexibilidade e adaptabilidade devido à heterogeneidade de pedidos por parte dos clientes, pelo que o conhecimento técnico-científico são essenciais nesta atividade. Neste estágio pretende-se desenvolver e/ou adaptar e validar um método cromatográfico (HPLC) para substituir um método IPC existente, já algo desatualizado e com algumas desvantagens técnicas. Para este trabalho será também necessário preparar e/ou purificar produtos que servirão como padrões. O candidato a estágio ideal deverá ter sólidos conhecimentos técnico-científicos de cromatografia, especialmente HPLC, sendo também vantajoso conhecimentos de química orgânica. Conhecimentos de estimativas de incertezas e propagação de erros será também muito valorizado.</p>	
	ORIENTADOR(ES):	Carlos Sousa, carlos.sousa@cipan.pt	
	LOCAL:	 Cipan	CIPAN
36	TÍTULO:	Validação de método cromatográfico para contaminação cruzada	
	RESUMO:	<p>A questão das contaminações cruzadas é de grande importância na indústria de proteção de plantas. Este tipo de contaminações podem dar origem a efeitos de fitotoxicidade que podem colocar em causa toda a produção de um agricultor, bem como a reputação do fabricante da formulação. Deste modo é necessário garantir que as linhas de formulação nas fábricas estão devidamente limpas e livres de contaminantes. Para tal é necessário ter métodos robustos para a análise de um conjunto bastante alargado de substâncias activas em matrizes complexas e bastante heterogêneas. Com o presente tema de mestrado pretende-se validar metodologias analíticas, com um grande enfoque em cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massa, para a quantificação de resíduos de substâncias activas (entre 5 a 8 novas substâncias activas) em líquidos e/ou sólidos de lavagem dos equipamentos fabris.</p>	
	ORIENTADOR(ES):	Rute Pires, rute.pires@ascenza.rovensa.com	
	LOCAL:	 ASCENZA	ASCENZA Agro
37	TÍTULO:	Estudo da influência dos co-formulantes na estabilização de substâncias activas em produtos fitofarmacêuticos	
	RESUMO:	<p>O presente tema de dissertação tem como objectivo estudar a influência dos co-formulantes usados na estabilização de substâncias activas fitofarmacêuticas em formulações de produtos de protecção de plantas. Os casos de estudo a considerar para a dissertação relacionam-se com a classe das sulfonilureias (SUs). Estas são herbicidas de acção residual, que são aplicadas em doses extremamente reduzidas (na ordem das g/ha) sendo que são caracterizadas por serem instáveis quando em contacto com água. Deste modo, com a presente dissertação pretende-se estudar as interações dos co-formulantes com as SUs e aumentar a sua eficiência. No decorrer do estágio serão elaboradas formulações sólidas e/ou líquidas com SUs, estudos de estabilização das SUs em diferentes meios e estudo</p>	

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc em QUÍMICA'

		da vida útil dos produtos fitofarmacêuticos. Serão aprendidas metodologias de como formular um agroquímico, com maior interesse nas seguintes formulações: Dispersão em óleo (OD) e grânulos dispersáveis em água (WG). Serão adquiridos conhecimentos sobre os diferentes co-formulantes a utilizar por tipo de formulação. O aluno que escolher este tema de mestrado terá um contacto bastante próximo com técnicas de análise de propriedades físico-químicas essenciais ao desenvolvimento de uma formulação tais como a viscosidade, determinação do pH, distribuição de tamanho de partícula, entre outros. Pretende-se conhecer qual/quais as famílias químicas que melhor estabilizam as SUs, bem como o impacto ao adicionar os estabilizantes nas diferentes etapas da formulação.
	ORIENTADOR(ES):	Teresa Pinto, teresa.pinto@ascenza.rovensa.com
	LOCAL:	 ASCENZA Agro
38	TÍTULO:	Development of new methodologies for the synthesis of metabolites of Phytopharmaceutical active ingredients
	RESUMO:	<p>Evaluation of the safety profile of active phytopharmaceutical ingredients (APIs) is important for Plant Protection Product. Therefore, synthesis and determination of the activity of metabolites is required. A very common phase one metabolism involves the degradation or site modification of the API. In line with this demand, the purpose of this project is to develop new strategies for the synthesis of metabolites of APIs that are of interest to ASCENZA Portugal. To accomplish this objective, we will explore available protocols and develop new methodologies for late-stage modification of APIs and mimic the transformations carried by the nature. Transformations such as hydrolysis, hydroxylation, halogenation and dehalogenation, ester or ether cleavage, deamination are examples of reactions of interest. All synthesized targeted metabolites will be fully characterized by Nuclear Magnetic Resonance (NMR) in FCUL. The purification by HPLC preparative and characterization by Mass spectrometry (MS) will be done in ASCENZA Agro facilities.</p> <div style="text-align: center;">  <p><i>phytopharmaceutical active ingredients</i> <i>metabolites</i></p> </div> <p>Figure 1. Example of metabolites synthesis</p>
	ORIENTADOR(ES):	Carlos Monteiro, carlos.monteiro@ascenza.rovensa.com
	LOCAL:	 ASCENZA Agro
39	TÍTULO:	Desenvolvimento de uma Metodologia Analítica para a Análise de Substâncias Dopantes em Contexto Desportivo
	RESUMO:	<p>A exigência competitiva em ambiente desportivo é, atualmente, cada vez mais elevada. Assim, por forma a atingir melhor desempenho e, consequentemente, vantagem competitiva, os praticantes desportivos recorrem, frequentemente, a substâncias químicas com efeito dopante. A Agência Mundial Antidopagem (WADA – <i>World Anti-Doping Agency</i>) tem como principal objetivo o controlo do uso destes agentes dopantes, de maneira a que em ambiente desportivo seja seguido e cumprido o lema <i>Play-True</i>. Estes compostos com efeito dopante e sujeitos a controlo, estão inseridos na lista de substâncias e métodos proibidos em contexto desportivo, cuja atualização é da responsabilidade da entidade WADA. De uma forma geral, o desenvolvimento de metodologias analíticas cientificamente inovadoras para a análise de substâncias dopantes, é uma necessidade constante por parte dos laboratórios antidopagem. Assim, o presente trabalho tem como premissa o recurso a técnicas modernas de preparação de amostras, com análise posterior por cromatografia líquida e/ou gasosa (LC e GC) acopladas à espetrometria de massa (MS). Neste sentido, é de realçar a microextração adsorviva em barra (BAμE), que aparece como uma técnica inovadora e amiga do ambiente. Esta técnica consegue atingir sensibilidade ao nível vestigial para os analitos previamente selecionados. De modo a atingir elevada sensibilidade e seletividade, o desenvolvimento deste tipo de metodologias inclui uma fase de otimização de diversos parâmetros analíticos, tais como a fase sorvente a usar, o tempo de extração e pH da matriz. Posteriormente, a validação da metodologia será efetuada de acordo com os requisitos da WADA e da NP ISO 17025, com recurso às tecnologias de GC-MSⁿ e/ou LC-MSⁿ, pretendendo-se determinar alguns parâmetros relevantes, tais como: seletividade/especificidade, capacidade de identificação, limiares analíticos, robustez, recuperação, entre outros.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Carlos Almeida, carlos.almeida@ipdj.pt
	LOCAL:	 Laboratório de Análises de Dopagem
40*	TÍTULO:	23 projetos no domínio da bioquímica
	RESUMO:	A disponibilizar pela Coordenação em caso de interesse
	ORIENTADOR(ES):	-
	LOCAL:	 Instituto de Medicina Molecular
41*	TÍTULO:	11 projetos no domínio da bioquímica
	RESUMO:	A disponibilizar pela Coordenação em caso de interesse



Ano Letivo - 2022/23

LISTA FINAL DE PROJETOS PARA DISSERTAÇÃO DO 'MSc EM QUÍMICA'

ORIENTADOR(ES):	-	
LOCAL:	 INSTITUTO GULBENKIAN DE CIÊNCIA	Instituto Gulbenkian de Ciência

*Um tema por instituição