







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

1	TÍTULO:	Desenvolvimento de novos conjugados ruténio-péptido para a terapia seletiva do cancro da mama metastático
	RESUMO:	<p>O cancro é uma das principais causas de morte no mundo e o número total de casos continua a aumentar. As estratégias para o controlar são focadas em tratamentos convencionais, nomeadamente radioterapia e quimioterapia que apresentam baixo índice terapêutico e efeitos secundários graves.</p> <p>Este projeto tem como principal objetivo ultrapassar essas limitações através do desenvolvimento de sistemas eficientes de entrega seletiva de fármacos aos tumores. A estratégia para o atingir foca-se nas diferenças que existem entre as células cancerosas e as saudáveis. 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 (RuPC's) cuja estrutura tem como base complexos organometálicos de ruténio bastante eficientes na destruição de células cancerosas da mama MCF7 e MDAMB231 (<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. O trabalho compreende as seguintes vertentes:</p> <ul style="list-style-type: none"> i) Síntese de novos complexos organometálicos de "RuCp"; ii) 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; iii) Síntese dos péptidos e dos RuPC's; iv) Os péptidos e os RuPC's serão purificados e caracterizados por HPLC semi-preparativo, HPLC analítico e ESI-MS; v) Avaliação das potencialidades anti-tumorais dos novos RuPC's 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>
	ORIENTADOR(ES):	Tânia Morais, tsmorais@fc.ul.pt ; João Galamba Correia (CTN/IST)
	LOCAL:	 
2	TÍTULO:	Variação sazonal de níveis de nutrientes na foz do Rio Trancão – Avaliação metroológica
	RESUMO:	<p>As políticas de proteção dos recursos ambientais hídricos baseiam-se na monitorização regular da sua saúde. Esta monitorização deve ter uma qualidade adequada e produzir informação objetivas sobre níveis e tendências da contaminação. A objetividade da informação analítica é conseguida através da avaliação da incerteza da medição dos contaminantes e da sua variação [1,2]. A caracterização de compartimentos ambientais vastos é afetada pela sazonalidade dos sistemas ambientais, pela heterogeneidade da sua composição e pela representatividade da amostragem. A incerteza da avaliação do sistema ambiental deverá ter em conta esses fatores. Recentemente foi desenvolvido uma ferramenta numérica de avaliação da incerteza da monitorização ambiental de sistema ambientais vastos que permite tornar objetivo este tipo de trabalho analítico [2]. O rio Trancão é um afluente do Rio Tejo no qual convergem diversas ribeiras da zona oriental da Grande Lisboa que estão sujeitas a múltiplas pressões antropogénicas. A saúde ambiental do rio tem melhorado significativamente nos últimos anos, mas merece um acompanhamento regular. O projeto de mestrado envolve a primeira avaliação, com incerteza conhecida, de variações sazonais do teor de nutrientes da água da foz do rio Trancão com vista a obter informação objetiva e vinculativas sobre a saúde deste rio. As amostras recolhidas em coordenadas GPS conhecidas serão analisadas por métodos validados baseados em cromatografia iónica.</p> <p>O aluno(a) que realize este projeto vai ganhar competências com elevada empregabilidade na colheira de amostras, validação de procedimentos da análise, avaliação da incerteza da medição, controlo da qualidade de análises e acreditação de ensaios (www.ipac.pt).</p> <p>1. A. Cardoso, R. Costa, S. Neves, C. Oliveira, R. B. Silva, <i>Microchem. J.</i> 165 (2021) 106129; 2. C. Borges, R. B. Silva, C. Palma, <i>Mar. Pollut. Bull.</i> 158 (2020) 111371; 3. R. B. Silva, <i>Talanta</i> 148 (2016) 177-190</p>
	ORIENTADOR(ES):	Ricardo Bettencourt da Silva, rjsilva@fc.ul.pt ; Cristina Oliveira
	LOCAL:	 
3	TÍTULO:	Compostos de Fe(II) derivados de nucleósidos para aplicação em magnetismo molecular
	RESUMO:	<p>Os objectivos propostos neste trabalho são:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1- Síntese e caracterização de ligandos orgânicos derivados de nucleósidos. 2- Síntese e caracterização de compostos de coordenação de Fe(II). 3- Verificação da aplicação dos compostos como interruptores magnéticos. 4- Verificação da influência dos nucleósidos na morfologia e propriedades dos compostos novos de Fe(II).

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







		<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. Neste sentido, pretende-se preparar materiais com compostos de coordenação de Fe(II) que possuem a propriedade de transição de spin em conjugação com as propriedades que os nucleósidos lhes podem conferir, isomeria e quiralidade. 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, pmmartinho@ciencias.ulisboa.pt ; Nuno Xavier, nmxavier@ciencias.ulisboa.pt
	LOCAL:	
4	TÍTULO:	Reconhecimento de aniões e pares iónicos orgânicos por receptores ditópicos baseados em calixarenos
	RESUMO:	<p>A reacção de condensação do <i>p-ter</i>-butilfenol com formaldeído em meio básico conduz à formação de compostos macrocíclicos denominados calixarenos (esq. 1). Estes macrociclos têm atraído enorme atenção, particularmente no âmbito da química hospedeiro-hóspede e da química supramolecular. Representam uma classe extremamente versátil de receptores e transportadores de iões ou de moléculas neutras. A relativa facilidade de síntese dos calixarenos precursores e a sua posterior funcionalização (quer nos anéis aromáticos, quer nos grupos hidroxilos), juntamente com a grande variedade de tamanhos da cavidade e de conformações do macrociclo, torna-os muito atractivos para aplicações industriais.</p> <div style="text-align: center;"> <p>(esq. 1)</p> </div> <p>É sabido que os aniões desempenham importantes papéis em biologia, em medicina e no meio ambiente, pelo que a obtenção de receptores sintéticos para encapsular aniões é actualmente um assunto em grande desenvolvimento. Os grupos NH de compostos de ureia permitem a formação de fortes ligações de hidrogénio, propriedade que tem sido utilizada na construção de receptores de aniões. Por outro lado, os receptores ditópicos, moléculas hospedeiras capazes de complexar simultaneamente ambos os iões de um dado sal, têm sido recentemente sintetizados e constituem uma área emergente em química supramolecular, apresentando aplicações importantes nas áreas biológicas e analíticas.</p> <div style="text-align: center;"> </div> <p>Neste trabalho vão ser sintetizados homooxalixarenos (calixarenos análogos ao calix[4]areno 1, nos quais as pontes CH₂ são parcial ou completamente substituídas por grupos CH₂OCH₂) contendo unidades ureia no anel inferior. Irão ser sintetizados calixarenos derivados do <i>p-ter</i>-butildihomooxalix[4]areno (2) e do <i>p-ter</i>-butilhexahomotrioxalix[3]areno (3), através de reacções de alquilação dos grupos OH (coroa inferior). Os novos compostos serão caracterizados através das técnicas usuais (p.f., IV, RMN de protão e carbono, análise elementar) e ainda determinada a sua conformação em solução por RMN (experiências de 1D e 2D, como COSY e NOESY). A afinidade destes novos receptores relativamente a vários tipos de aniões e sais orgânicos (sais de alquilamónio e aminas biogénicas, como os neurotransmissores dopamina e tiramina) vai ser determinada através de técnicas espectroscópicas, nomeadamente RMN de protão e UV-visível.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Paula Marcos, pmmarcos@fc.ul.pt
	LOCAL:	
5	TÍTULO:	Análise sistemática de σ-holes em calcogénios
	RESUMO:	As ligações de calcogénio ("chalcogen bonds") são interacções do tipo R ₂ Ch...B onde Ch é um elemento do grupo 16

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






	<p>(e.g. S, Se, Te) e B é uma base de Lewis (Figura 1). A existência destas ligações tem origem na existência de zonas positivas no potencial electrostático do elemento Ch, denominadas σ-holes (Figura 1), que possibilitam a sua interação com parceiros de carregados negativamente (por exemplo, bases de Lewis). As ligações de calcogénio são muito importantes em catálise, engenharia de cristais, desenho de materiais, reconhecimento e transporte de iões e até aplicações biomoleculares. Neste contexto, é de extrema importância uma análise estatística da variação da magnitude dos σ-holes (que são indicadores da capacidade de doação de ligações de calcogénio) na medida em que este conhecimento permite perceber como varia esta propriedade com os diversos substituintes, permitindo também uma maior racionalidade no uso destas ligações em aplicações químicas como as mencionadas acima. Inspirados numa publicação anterior [1] para uma ligação semelhante denominada ligação de halogénio [2], neste trabalho, irão ser utilizados métodos computacionais baseados em mecânica quântica para realizar uma análise estatística de compostos de enxofre e selénio presentes em bases de dados como a ZINC (usada para <i>virtual screening</i> em química medicinal) ou a Cambridge Structural Database (usada para depósito de estruturas cristalográficas).</p> <div style="text-align: center;"> </div> <p>Figura 1. Representação esquemática de uma ligação de calcogénio.</p> <p>NOTA: Os alunos seleccionados para este projecto, e após registo da Tese, são elegíveis para submeterem a uma candidatura ao BioISI Junior Programme que atribuirá 8 Bolsas de 6 meses. O critério de selecção será o mérito académico dos candidatos.</p> <p>[1] Kolář MH, Carloni P, Hobza P. Statistical analysis of σ-holes: a novel complementary view on halogen bonding. <i>Phys Chem Chem Phys.</i> 2014; 16: 19111–19114; [2] Costa PJ. The halogen bond: nature and applications. <i>Phys Sci Rev.</i> 2017; 2: 488.</p>
<p>ORIENTADOR(ES): LOCAL:</p>	<p>Paulo Costa, pjcosta@fc.ul.pt</p>
<p>6</p>	<p>TÍTULO: Exploring new hybrid titanate nanotubes as innovative UV filters for dermocosmetic applications</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>In recent years, one-dimensional nanostructures such as nanowires, nanotubes, and nanorods have been intensively studied because of their promising applications in various fields, including photovoltaics and photocatalysis. Titanate nanotubular materials (TNT) have attracted increasing attention in recent years as an alternative to TiO₂, since they have similar structure and bandgap, but larger surface area. TNT possesses a layered structure, intercalated by Na⁺ that can be easily exchanged. Due to their elongated morphology, they exhibit improved photo-generated charge carrier separation. However, to better understand the performance of such materials and to propose them for future technological applications, e.g. as UV filter, more studies are essential. UV-filters are materials used to protect something (e.g., skin, food) against UV radiation damage, by absorbing, reflecting, or scattering it. The true mechanism of action of those products and their safety, for human use, especially for long term use, are not always well understood. The impact of their discharge in the environment after use, is also an important issue that should be carefully addressed. In line with this topic, this work aims to explore the use of new hybrid titanate nanotubes (TNTs), to slow down, or to suppress (undesirable) photo-oxidation of cellular components or macromolecules, when submitted to UV-visible radiation. To accomplish this goal, TNTs will be treated with biocompatible elements, like biomass, to produce new hybrid nanomaterials. After structural and morphological characterization, their photocatalytic properties will be carefully analyzed. The best samples will be incorporated in commercial sun-protective products and tested to evaluate their ability to act as UV filters, under sun radiation.</p>
<p>ORIENTADOR(ES): LOCAL:</p>	<p>Olinda Monteiro, ocmonteiro@fc.ul.pt</p>
<p>7</p>	<p>TÍTULO: Protein solvation in deep eutectic solvents</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>Deep eutectic solvents (DES) are an emerging class of mixtures characterized by a depression of their melting points, relative to those of the constituent components¹. DES are formed through the complexation of an ionic species and a hydrogen-bond donor, although ternary DES have also been formed. In addition, DES containing water are also commonly used. While the melting point depression and other exquisite physicochemical properties have been associated with a complex hydrogen-bond network, a molecular understanding of these solvents' properties remains elusive. A particularly interesting application of DES concerns the study of protein stability and activity in the complete absence of water or in limited hydrated environments. While proteins have been shown to largely lose their native structure in organic solvents, less is known about their behavior in DES. In this project we aim to study, through molecular dynamics simulations, the transport properties of a DES with and without water, and the solvation of a simple protein in these solvents. The main goal is twofold (1) understanding the relationship between properties such as the viscosity and the diffusion coefficient of the constituents and the hydrogen-bond dynamics of the DES, and (2)</p>



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





		the stability of a typical protein in the DES with and without water. ¹ Benworth <i>et al.</i> , Deep Eutectic Solvents: A Review of Fundamentals and Applications, Chem. Rev. 2021, 121, 3, 1232–1285
	ORIENTADOR(ES):	Nuno Galamba, nigalamba@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
8	TÍTULO:	O mundo químico invisível das impressões digitais revelado por espectrometria de massa
	RESUMO:	Nas Ciências Forenses, a análise do padrão das impressões epidérmicas digitais, palmares e/ou plantares representa um dos três métodos primários de identificação humana. Os métodos lofoscópicos tradicionais baseiam-se, essencialmente, na comparação dos padrões epidérmicos dactilares observáveis, por exemplo, num vestígio, com aqueles constantes na base de dados criminal (<i>AFIS, Automatic Fingerprint Identification System</i>) ou por comparação direta com os padrões epidérmicos de um dado suspeito. No entanto, uma impressão digital contém mais informação do que aquela transmitida apenas através do seu grafismo físico (dactilograma). Na ausência de um vestígio lofoscópico com valor identificativo, a análise da sua composição química pode também revelar dados que auxiliam no processo de identificação, nomeadamente, dados sobre o género, estilo de vida, idade, entre outros. A utilização de abordagens <i>untargeted</i> (globais) de metabolómica, particularmente associadas à espectrometria de massa de ressonância ciclotrónica de ião com transformada de Fourier (FT-ICR-MS), permitiu explorar a complexidade e diversidade dos resíduos dermopapilares, levando à identificação de inúmeras espécies químicas, desde aminoácidos, lípidos e glúcidos. De particular interesse forense são as substâncias exógenas, como fármacos, drogas, produtos de higiene pessoal e aditivos alimentares. Porém, em condições reais, a revelação das impressões digitais latentes requer geralmente o uso de diferentes reagentes (e.g. pós, cianoacrilato) que, naturalmente, interferem com a análise dos vestígios químicos das próprias impressões digitais, dificultando a sua caracterização por espectrometria de massa. Assim, o presente projeto objetiva a caracterização química dos resíduos de impressões digitais em situações próximas das reais, considerando a amostragem, extração e preparação de extratos, antes e após a aplicação dos agentes de revelação mais convencionais. Os resíduos das impressões digitais serão analisados por FT-ICR-MS com vista à caracterização do seu perfil químico e análise do efeito da aplicação dos diferentes agentes de revelação. A identificação dos compostos será feita recorrendo a bases de dados de acesso público (nomeadamente a <i>Human Metabolome Database, HMDB</i>) e outras que serão criadas especificamente para este trabalho.
	ORIENTADOR(ES):	Marta Silva, mfsilva@ciencias.ulisboa.pt ; Áurea Carvalho (IUCS-CESPU)
	LOCAL:	 Lab. de FT-ICR e MS Estrutural
9	TÍTULO:	Avaliação computacional de novos derivados da isoniazida com acção antituberculosa
	RESUMO:	A tuberculose (TB) era até 2019 a doença infecciosa com o maior número de vítimas mortais no mundo e estima-se que cerca de um quarto da população mundial esteja actualmente infectada com TB [1]. O tratamento da TB, na maioria dos casos, tem por base a isoniazida (INH), um dos dois compostos mais eficazes no combate à doença, em combinação com outros antibióticos. Porém, a resistência à INH tem vindo a aumentar de forma muito preocupante e deve-se principalmente a mutações no enzima catalase-peroxidase que interferem com a activação deste fármaco. Vários derivados promissores da INH já foram reportados na literatura, e em particular um derivado com uma longa cadeia alquílica (INH-C ₁₀) mostrou ser mais eficaz do que a INH para a S315T, uma das mutações mais relevantes em todo o mundo [2]. Recentemente, a partir de uma conjugação de dados experimentais e computacionais, verificámos que a INH-C ₁₀ compensa uma menor reactividade, comparativamente com a INH, com uma muito maior permeabilidade na membrana da célula [3]. Estes resultados estiveram na base de um projecto recentemente financiado pela FCT em que a nossa equipa está a tentar desenhar compostos que apresentem simultaneamente grande reactividade e boa permeabilidade nas membranas celulares. Neste trabalho, propomos uma avaliação computacional de uma série de compostos derivados da INH com alquilação e dupla alquilação. A reactividade será estudada a partir de um protocolo baseado em cálculos QM (usando o software Gaussian), enquanto que a permeabilidade será estimada a partir de simulações de dinâmica molecular em modelos de membrana, usando o software GROMACS. [1] "Global tuberculosis report 2020". World Health Organization. Retrieved 05-05-2021. [2] F. Martins, F et al. <i>Eur. J. Med. Chem.</i> 2014 , 81, 119–138 [3] D. Vila-Viçosa et al. <i>Mol. Pharmaceutics</i> 2017 , 14, 4597–4605
	ORIENTADOR(ES):	Miguel Machuqueiro, machuque@ciencias.ulisboa.pt ; Filomena Martins
	LOCAL:	  
10	TÍTULO:	Síntese e caracterização de materiais para adsorção de etano e etileno
	RESUMO:	A indústria de biodiesel gera enormes quantidades de glicerina para as quais ainda não há sustentabilidade e valorização total. Considerando os grandes volumes de glicerina provenientes da produção de biodiesel, é imperioso encontrar

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

		<p>novas aplicações para esses produtos químicos. A produção de carvão ativado a partir glicerina poderá ser uma boa alternativa para o uso do glicerina produzida na produção de biodiesel. O presente tema enfoca metodologias de preparação, modificação e caracterização de carvões nanoporosos a partir da glicerina da produção de biodiesel. Os materiais obtidos a partir de glicerina serão preparados por procedimentos adaptados da literatura. O processo de otimização da preparação dos materiais será monitorado por adsorção de N₂ a baixa temperatura. Para as amostras selecionadas, a caracterização será realizada por adsorção de N₂ a baixa temperatura, análise elementar, difratogramas de raios-X, microscopia eletrónica de varrimento, determinação das análises pH_{PZC} (ponto de carga zero), FTIR e TG/DTA e DSC.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Mary Batista, mkbatista@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
11	TÍTULO:	Materiais porosos para o armazenamento e libertação de gases com fins terapêuticos
	RESUMO:	<p>A libertação de gasotransmissores, nomeadamente óxido nítrico e sulfureto de hidrogénio, em sítios específicos do corpo humano pode levar a novas terapias de várias doenças importantes. Estas moléculas atuam como sinalizadores na regulação de vários sistemas vitais. As soluções atuais, baseadas em moléculas orgânicas, não permitem uma libertação localizada eficiente em locais específicos do corpo humano, porque se distribuem pelos tecidos e fluidos, causando efeitos secundários indesejados e desregulando o funcionamento normal de tecidos e sistemas. Os materiais nanoporosos podem armazenar gases e serão usados para desenvolver veículos de gasotransmissores, para os liberar em sítios localizados do corpo para ação terapêutica, resolvendo os problemas associados às soluções atuais. Com a engenharia do sistema de poros, da natureza química e da superfície externa, os novos materiais irão ter propriedades combinadas melhoradas: (i) elevada capacidade de armazenamento estável de gasotransmissores, (ii) libertação lenta ajustável em meios fisiológicos durante várias horas, (iii) excelente biocompatibilidade. O desafio final será a demonstração do controlo de processos biológicos com os novos materiais que libertam os gasotransmissores de forma lenta.</p> <p>Será efetuada uma avaliação preliminar da aplicação terapêutica à cicatrização de feridas. Estes resultados são uma primeira validação para aplicações tópicas. O presente trabalho envolve técnicas experimentais de preparação e caracterização de materiais porosos, técnicas de adsorção e também algumas técnicas de natureza bioquímica relativas a estudos com células.</p>
	ORIENTADOR(ES):	João Silva, jpsilva@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
12	TÍTULO:	Desenvolvimento de metodologias analíticas inovadoras para controlo de drogas em matrizes biológicas com interesse forense
	RESUMO:	<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 adsortiva em barra (BAμE), tornam-se relevantes uma vez terem demonstrado serem alternativas efetivas a diversas metodologias convencionais bem estabelecidas.</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 espetrometria de massa (GC-MS) e/ou</p>



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

		<p> 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, <i>J Chromatogr A</i>, 1217 (2010); [2] J.M.F. Nogueira, <i>Anal Chim Acta</i>, 757 (2012); [3] A.H. Ide, J.M.F. Nogueira, <i>Anal and Bioanal Chem</i>, 410 (2018); [4] A.H. Ide, J.M.F. Nogueira, <i>J Pharm and Biomed Anal</i>, 153 (2018).</p>
	ORIENTADOR(ES):	José Nogueira, nogueira@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
13	TÍTULO:	Desenvolvimento de materiais de cátodo inovadores para baterias de ião metálico
	RESUMO:	<p>No actual panorama energético, as baterias de ião lítio surgem como uma ótima solução, mas também como um problema. Se por um lado exibem elevados valores de potência e energia específicas, alta ciclabilidade e custo acessível, por outro lado a inerente necessidade de um componente – o lítio – cada vez mais escasso, condiciona a sustentabilidade desta opção de armazenamento de energia a médio prazo. Com efeito, a disponibilidade de recursos minerais de lítio é muito limitada e, de entre estes, as fontes não recalcitrantes deste metal estão actualmente quase esgotadas. Também a re-utilização do lítio obtido conseguido pela reciclagem das unidades existentes não é uma solução economicamente viável, o que se traduz num problema ambiental. A procura de alternativas a estes dispositivos tem passado por manter a tecnologia existente, dada a sua comprovada eficácia, e substituir o ião metálico. Esta simples alteração revelou-se de difícil concretização uma vez que os materiais de cátodo – tipicamente tipo espinela – não conseguem acomodar reversivelmente iões de maior dimensão. Uma abordagem que tem sido estudada nos nossos laboratórios é a utilização de matrizes porosas e com alguma elasticidade mecânica – polímeros condutores -que possam acondicionar iões de diferentes dimensões. A utilização de sódio como ião metálico activo foi já explorada com bons resultados. Esta alternativa reduz ligeiramente o desempenho eléctrico específico da unidade (fruto da maior massa e menor potencial de redução do Na⁺ face ao Li⁺), mas permite ultrapassar todos os problemas anteriormente enunciados das baterias de ião-Lítio. Este projecto visa colmatar esta redução através do aumento da carga eléctrica que pode ser armazenada. Para tal será avaliada uma abordagem inovadora que consiste na utilização de iões divalentes na dopagem pseudocatónica de polímeros condutores.</p> <p>Serão sintetizadas electroquimicamente matrizes de poli(etilenodioxitiófenos) (PEDOT) ou poli(pirrole) (PPy) na presença de poli(2-acrilamido-2-metil-1-propanosulfonato) (PAMPSA) ou poli(estirenosulfonato) (PSS) como aniões dopantes, sobre eléctrodos de platina. Estes filmes serão caracterizados por elipsometria, goniometria de ângulos de contacto e microscopia de alta resolução. A sua conversão redox será estudada em meio orgânico contendo um catião divalente no electrólito de suporte (Mg²⁺ ou ião de metal de transição). A reversibilidade química e estrutural do processo redox do polímero será acedida por métodos electroquímicos (potenciodinâmicos e cronoamperométricos) acoplados a técnicas sensíveis à modificação de superfícies (microgravimetria e elipsometria in-situ). A participação individual de cada ião no fluxo iónico decorrente da transformação redox do polímero, será obtida por ensaios de deflexão de feixe laser, baseado no efeito miragem, que permite a discriminação iónica individual da transferência de massa causada pelos eventos associados de transferência de carga.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Jorge Correia, jmcorreia@fc.ul.pt
	LOCAL:	 
14	TÍTULO:	Late-stage oxygenation of active ingredients
	RESUMO:	<p>Analysis of the safety profile of active ingredients (AIs) is important for plant protection product development. As part of this process, synthesis and subsequent determination of (eco)toxicity of metabolites is required. A very common phase one metabolism involves oxygenation reactions catalyzed by cytochrome P450 enzymes. Accordingly, the goal of this project is to synthesize aromatic and benzylic hydroxylated metabolites of AIs that are of interest to ASCENZA Agro. ASCENZA Agro is an agrochemical company with a long experience in the crop protection business since 1965, being Iberian leaders in off-patent products.¹ In order to achieve this goal, we will explore available protocols that allow for the late-stage C–O bond formation. In particular, we will use the method described by Ritter and co-workers for the direct C–H oxygenation using bis(methanesulfonyl) peroxide as an oxidant (Scheme 1)²⁻⁴—this method generates mesylate derivatives, which can be converted into the corresponding alcohols by using readily available methods. All synthesized targeted oxygenated metabolites will be fully characterized by Nuclear Magnetic Resonance (NMR) and Mass spectrometry (MS).</p>



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

	<p>Scheme 1. Aromatic and Benzylic C-H oxygenation using MsOOMs.</p> <p>1. ASCENZA Agro, https://www.ascenza.pt; 2. Pletcher and co-workers, <i>J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1</i> 1975, 953; 3. Ritter and co-workers, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2018, 140, 16026; 4. Ritter and co-workers, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2019, 141, 17983.</p>
<p>ORIENTADOR(ES):</p> <p>LOCAL:</p>	<p>Jaime Coelho, jaimeacoelho@campus.ul.pt; Carlos Monteiro (ASCENZA Agro)</p>
<p>15</p>	<p>TÍTULO: Estudo de <i>N</i>-alquilamino 2',-3'- e 4'-cloropropiofenonas por GC-MS/MS e FTICR</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>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. Entre as NPS encontram-se as catinonas sintéticas, estruturalmente análogas à catinona, o principal alcalóide psicoativo presente na planta <i>Catha edulis</i>. A velocidade com que as NSP entram no mercado dificulta uma resposta rápida na sua identificação por parte das entidades competentes. No caso específico das catinonas existe uma grande dificuldade na distinção de algumas estruturas isoméricas, quando não existem padrões ou quando não existe quantidade suficiente para a sua identificação por RMN. Deste modo, neste projeto, propomos a caracterização de catinonas isoméricas que difiram na posição de um átomo de cloro no anel aromático com vista à sua identificação em diversas matrizes. O trabalho envolverá as seguintes etapas: i) obtenção, se necessário, de cloro-catinonas puras por síntese ou purificação de materiais apreendidos; ii) caracterização das catinonas por GC-MS/MS e FTICR; iii) Identificação das catinonas selecionadas em produtos apreendidos em Portugal. Este projeto será realizado no âmbito do protocolo entre a FCUL e o Laboratório de Polícia Científica da Polícia Judiciária (LPC-PJ).</p>
<p>ORIENTADOR(ES):</p> <p>LOCAL:</p>	<p>Helena Gaspar, hmgaspar@fc.ul.pt; Carlos Cordeiro</p>
<p>16</p>	<p>TÍTULO: Síntese de novos compostos análogos a nucleós(t)idos como potenciais agentes antibacterianos</p>
<p>RESUMO:</p>	<p>A resistência bacteriana aos antibióticos é considerada um problema e um desafio de saúde global, tornando urgente o desenvolvimento de agentes terapêuticos que exibam mecanismos de ação alternativos e inovadores. Neste sentido, processos biossintéticos ou enzimas menos focadas em abordagens terapêuticas, mas que desempenham funções cruciais à viabilidade e integridade das bactérias, devem ser consideradas. O peptidoglicano é uma estrutura glicoconjugada polimérica essencial da parede celular bacteriana, contendo cadeias heteropolissacarídicas constituídas por <i>N</i>-acetilglucosamina (GlcNAc) e ácido <i>N</i>-acetilmurâmico (MurNAc), interligadas por segmentos peptídicos. Compostos que interfiram na sua biossíntese perturbam a integridade da parede celular, podendo conduzir à lise da célula bacteriana [1]. Alguns antibióticos em uso clínico atuam em etapas extracelulares da biossíntese do peptidoglicano, nomeadamente os β-lactâmicos e os glicopéptidos, contra os quais as bactérias têm adquirido diferentes mecanismos de resistência. O objetivo deste trabalho é a síntese de novos compostos que possam inibir a fase intracelular da biossíntese do peptidoglicano, que é relativamente menos focada. Os compostos planeados pretendem mimetizar os precursores biossintéticos do peptidoglicano, que são açúcares de nucleósido difosfato baseados em UDP-<i>N</i>-acetilglucosamina e que atuam como substratos das enzimas Mur [1]. Serão sintetizadas moléculas cuja estrutura contém um sistema nucleosídico ligado a uma unidade monossacarídica através de um fragmento análogo ao grupo difosfato, as quais serão posteriormente avaliadas pelas suas atividades biológicas</p>

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






		<p>por meio de colaborações científicas já estabelecidas. A via sintética será do tipo convergente, ou seja, o nucleósido e o derivado monossacarídico funcionalizados adequadamente serão sintetizados separadamente e depois serão acoplados entre si com a formação de um fragmento bioisómero neutro do sistema difosfato. 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). Moléculas com estrutura mais simples que a do esqueleto molecular anteriormente descrito, nomeadamente nucleósidos e análogos de nucleósidos/açúcares mono e difosfato serão também alvos sintéticos, o que possibilitará estudar se estruturas que são fragmentos da estrutura <i>core</i> poderão exibir atividade biológica satisfatória, bem como permitir estudos de relação estrutura-atividade. Este trabalho pretende contribuir para o desenvolvimento de novas moléculas para abordagens terapêuticas inovadoras para as infeções bacterianas.</p> <p>[1] Resistance to antibiotics targeted to the bacterial cell wall, I. Nikolaidis, S. Favini-Stabile, A. Dessen, Protein Sci. 2014, 23(3), 243–259.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Nuno Xavier, nmxavier@fc.ul.pt
	LOCAL:	
17	TÍTULO:	Desenvolvimento de metodologia analítica para monitorizar níveis PPCPs prioritários em ambiente estuarino
	RESUMO:	<p>O presente projeto de dissertação visa o desenvolvimento de métodos analíticos alternativos para determinação vestigial de produtos farmacêuticos, de higiene e cuidado pessoal (PPCPs) com elevado impacto em matrizes aquosas com origem estuarina (ex. Tejo), recorrendo às inovadoras técnicas de microextração passiva seguida de análise por cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC). Numa primeira abordagem, o estudante irá avaliar a seletividade e eficiência de diversos materiais sorventes (e.g. materiais baseados em carbono e polímeros) como fases de revestimento ideais para enriquecimento vestigial através da técnica de microextração adsortiva em barra (BAμE), de diversas classes de compostos modelo criteriosamente selecionados. Para além da avaliação previamente estabelecida, a otimização e validação da metodologia desenvolvida, bem como a subsequente monitorização dos compostos em diversas amostras de água estuarina serão igualmente o foco deste estudo.</p> <div style="text-align: center;"> <p>Figura 1. Técnica de microextração adsortiva em barra (BAμE).</p> </div> <p>O presente projeto, do âmbito da Química Analítica (QA), proporcionará ao estudante a oportunidade de aprender a otimizar, desenvolver e validar metodologias analíticas a fim de determinar níveis vestigiais de PPCPs com impacto em matrizes ambientais, o que permitirá o contacto com metodologias inovadoras de enriquecimento prévio à análise instrumental. Com a formação adquirida o estudante ficará apto para posteriormente poder integrar um qualquer projeto ou posição numa instituição ou empresa que detenha laboratórios de análise química ambiental ou do controlo da qualidade.</p> <p>[1] N.R. Neng, A.R.M. Silva, J.M.F. Nogueira, J Chromatogr A,1217 (2010)</p>
	ORIENTADOR(ES):	Nuno Neng, ndneng@fc.ul.pt
	LOCAL:	
18	TÍTULO:	Revestimento nanocompósito para a bio-descontaminação de superfícies submersas
	RESUMO:	<p>A água é um recurso vital para o desenvolvimento e sobrevivência humana, contudo é limitado e encontra-se continuamente ameaçado por uma vasta gama de contaminantes quer químicos quer biológicos, por essa razão, torna-se urgente a sua utilização sustentável e segura. Atualmente, a legislação ambiental mais rigorosa restringe a utilização da maioria das estratégias convencionais de bio-descontaminação da água, devido à libertação contínua de compostos tóxicos e persistentes nos ecossistemas, apelando por estratégias mais ecológicas. Em conformidade com este objectivo global, neste projeto pretende-se desenvolver sistemas de revestimentos funcionais sem libertação de agentes tóxicos para o ambiente e adequados para a protecção de superfícies de base cimentícia, tipicamente aplicado em circuitos de tratamento e armazenamento de águas, contra a bioincrustação. A estratégia-chave</p>

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

		<p>compreende:</p> <p>i) Modificação de nanopartículas (NPs);</p> <p>ii) Imobilização das NPs mais promissoras num revestimento polimérico (ex: tinta) para gerar sistemas de protecção foto-ativos e/ou bioativos, para posterior caracterização e aplicação em amostras cimentícias;</p> <p>iv) Caracterização físico-química das NPs e revestimentos gerados e avaliação do desempenho dos revestimentos em cenários industriais simulados/reais;</p> <p>v) Divulgação do trabalho, que pode incluir contribuições e participação em eventos, e redacção da tese.</p> <p>O projecto visa contribuir para a implementação da Agenda da ONU 2030 (por exemplo, o objectivo 6 dos 17 SDGs da ONU), fornecendo novas funcionalidades de protecção às infra-estruturas de superfícies cimentícias, que também promoverão a atualização e reequipamento deste sector industrial. Resultados Esperados: Espera-se que o sucesso da metodologia proposta proporcione o desenvolvimento de um novo nanossistema bioativos com potencial atividade de fotodegradação, capaz de minimizar a libertação de agentes ativos tóxicos aliada às estratégias mais convencionais de descontaminação aplicadas em vários sectores, tais como água e estações de tratamento de águas residuais e/ou dessalinização. Os nano-agentes e revestimentos serão desenvolvidos essencialmente pela Faculdade de Ciências, sendo que as amostras cimentícias serão preparadas e testadas na empresa SECIL S/A, em particular testes simulados de envelhecimento e testes reais no porto privado da SECIL S/A.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Elisabete Silva, ersilva@fc.ul.pt ; Margarida Mateus (SECIL S/A)
	LOCAL:	
19	TÍTULO:	Desenvolvimento e aplicação de metodologias computacionais para investigar as propriedades de cristais de compostos farmacêuticos em solução
	RESUMO:	<p>A preparação de cristais a partir de solução é um dos passos mais importantes na preparação e purificação de materiais como, por exemplo, compostos farmacêuticos ativos (APIs). Durante este processo, pequenas modificações nas condições experimentais de cristalização, podem levar a diferentes empacotamentos moleculares nos cristais (polimorfos), os quais tem um impacto dramático nas propriedades físicas das substâncias produzidas (e.g., efeito terapêutico, compressibilidade, solubilidade, cor e temperatura de fusão). Por esse motivo, o polimorfismo pode representar um pesadelo durante as etapas de desenvolvimento de novos APIs ou na elaboração de novas formulações (e.g., medicamentos genéricos), mas pode também ser usado para melhorar as propriedades de um dado material (e.g., solubilidade). Assim, é importante desenvolver métodos teóricos que possam ser usados para prever as propriedades das diferentes fases cristalinas de um dado API e o seu comportamento em solução, reduzindo o tempo e dinheiro necessário para desenvolver um medicamento. Neste âmbito, é importante estudar a estabilidade relativa das diferentes fases cristalinas de um composto de forma a garantir, por exemplo, que as propriedades do API não são alteradas ao longo do tempo. Esta pode ser avaliada através de medidas de solubilidade, um dado que é necessário conhecer durante o desenvolvimento de um medicamento, onde a fase mais estável corresponde também à menos solúvel. Do que é do meu conhecimento, poucos estudos computacionais existem sobre este tema. Assim, este projeto tem como objetivo avaliar a possibilidade de utilizar métodos baseados em simulações de dinâmica molecular para:</p> <p>(i) Desenvolver uma metodologia computacional para avaliar o processo de crescimento e/ou dissolução de cristais.</p> <p>(ii) Verificar o efeito do tamanho de cristais na solubilidade de um composto e, desta forma, na sua estabilidade em solução.</p> <p>(iii) Aplicar os métodos desenvolvidos em cima para avaliar o comportamento de diferentes polimorfos, explicar resultados de solubilidade e investigar a sua estabilidade relativa.</p> <p>Estes estudos serão realizados para compostos como o paracetamol, que é um API frequentemente usado como antipirético e no alívio da dor, e a vanilina, que é frequentemente usada como excipiente e aromatizante em alimentos.</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> (a) </div> <div style="text-align: center;"> (b) </div> </div> <p style="text-align: center;">Figura 1. Estrutura molecular do (a) paracetamol (b) vanilina.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Carlos Bernardes, cebernardes@fc.ul.pt
	LOCAL:	
20	TÍTULO:	Biossensores eletroquímicos multi-enzimáticos para a deteção de compostos fenólicos em resíduos agro-industriais
	RESUMO:	Os desafios ambientais atuais implicam a redução de produtos químicos tóxicos, bem como a valorização de compostos, que são abundantes em vários resíduos, nomeadamente os agro-industriais. Os compostos fenólicos são





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

	<p>um bom exemplo, pois em determinadas concentrações são benéficos para a saúde humana, contudo, quando presentes no solo ou meio aquático podem ser nocivos para vários organismos. Os biossensores eletroquímicos têm um enorme potencial para se tornarem ferramentas analíticas selectivas, rápidas, confiáveis e de baixo custo na área ambiental, nomeadamente na deteção de compostos fenólicos, eliminando a necessidade de equipamentos caros e recursos humanos qualificados [1]. Os enzimas são a alma dos biossensores eletroquímicos catalíticos, uma vez que conferem a especificidade necessária ao analito a detetar, possibilitando uma análise seletiva. A conjugação concertada de mais do que um enzima na superfície do eléctrodo permitirá alargar o espectro de compostos a analisar. Ao construir um biossensor é crucial desenvolver uma interface que viabilize a imobilização robusta de biomoléculas funcionais no eléctrodo, assim como uma transferência de carga eficaz. O objetivo deste trabalho consiste no estudo e otimização da atividade catalítica de enzimas (lacase e tirosinase) industriais para a oxidação de compostos fenólicos de interesse, comuns em resíduos agro-industriais. Uma vez selecionados os enzimas e condições de operação, estes serão imobilizados em matrizes poliméricas bioinspiradas [2], e a sua atividade catalítica avaliada por métodos eletroquímicos. As principais tarefas a desempenhar são:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1 - Otimização da atividade enzimática em solução (tipo de enzima, tampão, pH), para os vários substratos, por espectrofotometria de UV-Vis e voltametria cíclica. 2 - Síntese eletroquímica das matrizes poliméricas e (co)imobilização dos enzimas selecionados. Caracterização dos eléctrodos modificados por métodos eletroquímicos, microscopia de força atómica, espectroscopia (FTIR, UV-Vis) e elipsometria. 3 - Avaliação das propriedades catalíticas das superfícies modificadas por cronoamperometria e determinação dos parâmetros analíticos da interface biossensora (constante de Michaelis-Menten aparente, sensibilidade, gama linear e limite de deteção), em amostras padrão e em extratos agro-industriais. <p>Este tema será desenvolvido no âmbito de uma colaboração com um grupo de investigação do <i>Research Institute on Terrestrial Ecosystems, Nápoles</i> e a Empresa Filandesa <i>METGEN</i>, fornecedora de enzimas resistentes e específicas para os compostos alvo.</p> <p>[1] 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) 462-471; [2] L. C. Almeida, R. D. Correia, B. Palys, J. P. Correia, A. S. Viana, <i>Electrochim. Acta</i> (2021) https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138515</p>
ORIENTADOR(ES):	Ana Viana; apsemedo@ciencias.ulisboa.pt
LOCAL:	 
21	TÍTULO: Ruthenium compounds that revert multidrug resistance in cancer therapy
RESUMO:	<p>A severe limitation to the efficacy of the drugs in clinical use for the treatment of cancer is multidrug resistance (MDR). One of the main mechanisms of MDR is the overexpression of membrane transport proteins, such as P-gp and MRP1, that pump drugs out of cells. The BIOIN CQE Research Group has been developing ruthenium organometallic compounds that target these exporters and address this important limitation in chemotherapy. Preliminary results identified the best metaldrug ever reported to inhibit P-gp [1] and that these compounds are cisplatin sensitizers in resistant lung cancer cell lines [2]. Despite these encouraging results, we still lack the molecular details of the interaction between our ruthenium inhibitors and P-gp, which would be pivotal to direct our synthesis efforts. Molecular Docking calculations of our Ru-derivatives will be performed in P-gp to investigate their preferential modes of binding and help us devise new modifications that can enhance their inhibitory activities.</p> <p>Objectives: Within this multidisciplinary M.Sc. proposal, we will merge computational (molecular docking) with experimental (rational synthesis of new compounds) studies to unveil the structural features that make these compounds unique and trigger an optimization process to achieve even better chemotherapeutics.</p> <p>Working Plan: This project offers an excellent formation in chemical synthesis (and compounds purification) using <i>Schlenk</i> techniques, together with several characterization techniques (e.g. FTIR, NMR, UV-Vis., MS) and <i>in silico</i> methodologies (Molecular Docking). The work is divided in four steps:</p> <ol style="list-style-type: none"> i) Molecular docking calculations using the metalodrugs exhibiting the most promising results, including a series of new derivatives aimed at improving their bioavailabilities; ii) Synthesis and purification of new organometallic compounds upon results from i); iii) Characterization: the new compounds will be characterized by the usual spectroscopic techniques, elemental analysis and X-ray diffraction whenever possible, between others; iv) Evaluation of the anticancer potential of the new compounds as MDR revertant (in the frame of ongoing collaborations). <p>[1] L. Côrte-Real et al. <i>Eur. J. Med. Chem.</i>, 2019, 10.1016/j.ejmech.2018.12.022 [2] R. Teixeira et al. <i>Inorg. Chem. Front.</i>, 2021, 10.1039/DOQ101344G</p>
ORIENTADOR(ES):	Andreia Valente, amvalente@ciencias.ulisboa.pt ; Miguel Machuqueiro
LOCAL:	  
22	TÍTULO: Desenvolvimento de metalofármacos para a terapia do cancro





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

RESUMO:	<p>O Cancro é a segunda maior causa de morte em países desenvolvidos e estima-se um crescimento de 70% do número de novos casos nas próximas duas décadas¹. O tratamento combina a remoção cirúrgica do tecido maligno (quando possível) com radio e/ou quimioterapia. Na área da quimioterapia, os metalofármacos (fármacos em que moléculas orgânicas estão ligadas a iões metálicos) têm desempenhado um papel de destaque pela sua eficiência. Os únicos metalofármacos aprovados para uso clínico em todo o mundo são a cisplatina, a carboplatina e a oxaliplatina, hoje prescritos ainda em 50 a 70% dos regimes terapêuticos². Embora extremamente eficazes, a elevada toxicidade e os efeitos secundários destes fármacos, bem como o desenvolvimento de resistência (intrínseca ou adquirida) ao tratamento² restringem a sua utilização. No desenvolvimento de novas opções terapêuticas para superar essas limitações, os compostos de ruténio, ferro e vanádio são dos mais proeminentes e têm demonstrado grande potencial^{3,4,5,6}. Os complexos de ruténio mostram menor toxicidade generalizada, além de uma maior eficácia e modos de acção distintos dos de complexos de platina, que os tornam eficazes em tumores que não respondem ao tratamento com estes últimos, sendo talvez dos mais estudados para quimioterapia. Três compostos chegaram já à fase de ensaios clínicos⁷ e a capacidade de inibir a formação de metástases foi identificada em vários complexos de ruténio⁷. O ferro é um nutriente essencial para quase todos os sistemas vivos e tem uma química redox rica que lhe confere um papel fulcral em processos biológicos importantes como o transporte de oxigénio, o crescimento e a replicação celular - processos essenciais à vida que também estão envolvidos em carcinogénese. O potencial de complexos de coordenação de ferro como agentes anticancerígenos tem sido reconhecido e atraído muito interesse⁸. O vanádio é um elemento essencial para vários organismos (nomeadamente alguns mamíferos) sendo provável, mas não comprovado, que seja também essencial para os seres humanos⁹. Os seus compostos de coordenação têm apresentado características favoráveis para aplicação terapêutica nomeadamente para a terapia do cancro^{6, 10}. A resposta terapêutica de um metalofármaco é o resultado da combinação de vários aspectos, sendo o ião metálico, o conjunto de ligandos na sua esfera de coordenação e a estrutura do complexo factores decisivos para a sua actividade. No design de metalofármacos, uma abordagem para obter compostos promissores envolve um ligando quelante robusto¹¹ com átomos doadores cuidadosamente escolhidos para estabilizar o metal (evitando a reatividade excessiva associada a efeitos secundários). No grupo <i>Bioinorganic Chemistry and Drug Development - BIOIN</i> do Centro de Química Estrutural têm sido desenvolvidas e testadas famílias de complexos baseadas em vários iões metálicos muito promissoras para o tratamento de tumores, com excelentes resultados quer <i>in vitro</i>^{3,4,5} quer <i>in vivo</i>¹². Das várias famílias de compostos estudados, os complexos de V(V), Fe(III) e Ru(III) com ligandos amino(bis)fenolato surgiram como um conjunto com imenso potencial ainda praticamente inexplorado na literatura^{4,5,6}. Neste trabalho pretende-se explorar a potencial sinergia entre iões metálicos e ligandos do tipo aminobisfenolato para obter compostos com boa actividade, na sequência de trabalho anterior em que se comprovou a grande eficiência de alguns complexos semelhantes quer no nosso grupo de trabalho^{4,5,6}, quer noutros grupos de investigação^{13,14}. Propõe-se para este trabalho de mestrado:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ a síntese de ligandos, que envolverá técnicas usuais em síntese química, e a sua caracterização por técnicas espectroscópicas diversas (IV, UV-Vis, RMN - ¹H, ¹³C, de correlação, etc.), espectrometria de massa e análise elementar; ▪ a síntese de complexos com iões metálicos que utilizará, se necessário, atmosfera inerte e técnicas de Schlenk. A caracterização dos complexos envolverá as técnicas espectroscópicas usuais (UV-Vis, IV, ¹H/¹³C RMN, EPR), espectrometria de massa, análise elementar e difração de raios-X (quando possível). <p>A avaliação da atividade anti-cancerígena em células tumorais humanas será realizada no âmbito de colaborações activas deste grupo de investigação (CQE – BioIN).</p> <p>Este tema oferece experiência laboratorial e uma excelente formação num conjunto alargado de técnicas fundamentais em síntese e caracterização. Combina a componente Química com a aplicação no campo da medicina, na área da Química Inorgânica Medicinal, oferecendo ao candidato uma formação sólida fundamental para uma boa integração no mercado de trabalho.</p> <p>[1. The World Health Organization website, http://www.who.int/cancer/en/. 2.a) <i>Nature Reviews Cancer</i>, 2007, 7(8), 573–584; b) <i>Dalton Trans.</i>(2018) 47(19), 6645–6653. 3. <i>Future Med. Chem.</i> (2016) 8(5): 527-544 4.a) <i>Dalton Trans.</i> (2019) 48, 8702-8716; 4.b) <i>Eur. J. Med. Chem.</i> (2019), 176, 492-512; 5.a) <i>Inorg. Chim. Acta</i> (2013) 394, p616-626; 5.b) <i>J. Inorg. Biochem.</i>(2017) 168, 27–37 6. <i>Inorg. Chem.</i> (2016) 55(2): 610–618 7. a) <i>Molecules</i> (2019) 24(10): 1995; 7.b) <i>Chem. Rev.</i> (2019) 119(2): 797–828; 7.c) <i>Coord. Chem. Rev.</i> (2016) 306, 86-114 8. <i>Coord. Chem. Rev.</i> (2020) 417, 213339 9. <i>Science</i> (1971) vol.174: 426-428 10. <i>Coord. Chem. Rev.</i>(2015) vol.301–302, 24-48 11. <i>Coord. Chem. Rev.</i> (2019) 388, 227-247 12. <i>Anti-cancer Agents Med. Chem.</i> 2017, 17 (1): 126–136 13.a) <i>J. Med. Chem.</i> (2019) 62, 8053-8061; 13.b) <i>Dalton Trans.</i> (2020), 49, 6842-6853 14. <i>Chem. Sci.</i> (2017) 8, 6865-6870.</p>
ORIENTADOR(ES):	Ana Tomaz, isabel.tomaz@ciencias.ulisboa.pt ; Isabel Correia (DEQ/IST)
LOCAL:	 
23	TÍTULO: Desenvolvimento de carvões ativados em pó a partir de cascas de pinhão para purificação de água potável
RESUMO:	Um dos principais desafios sociais da UE prende-se com 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






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

	<p>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/MerckMillipore) 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 sempre testados materiais comerciais como referência para os PAC desenvolvidos. Os ensaios de adsorção em fase líquida decorrerão maioritariamente no Núcleo de Engenharia Sanitária do LNEG (Laboratório Nacional de Engenharia Civil). O aluno terá oportunidade de desenvolver competências complementares:</p> <ul style="list-style-type: none"> 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; 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. 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>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>[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, Sci. Total Environ. 743 (2020) 140791.</p>
ORIENTADOR(ES):	Ana Carvalho, apcarvalho@fc.ul.pt ; Rui Viegas (LNEG)
LOCAL:	 
24	TÍTULO: Complexos de cobre(I) com fosfinas e ligandos heteroaromáticos como potenciais agentes anti-tumorais
RESUMO:	<p>Os metais de transição têm sido usados no tratamento de várias doenças desde os tempos antigos. A descoberta casual das propriedades da cisplatina como agente anticancerígeno, na década de 1960, fez emergir o interesse pela utilização de metais em medicina e estimulou a síntese e estudo de novos compostos de coordenação com vista ao desenvolvimento de metalofármacos eficientes e seguros. A investigação estendeu-se rapidamente a outros metais e fez surgir a Química Inorgânica Medicinal como uma nova área científica, cujo crescimento tem sido marcante ao longo das últimas décadas. O cobre é um dos metais vestigiais essenciais nos organismos vivos, com funções centrais em diversos metaloenzimas, principalmente ligadas à sua actividade redox. Tem também importantes utilizações clínicas devido às suas propriedades antimicrobianas em geral e como desinfectante.</p> <p>Complexos de cobre(I) têm revelado actividade citotóxica relevante em diferentes linhas celulares humanas, com mecanismos de acção ainda pouco conhecidos, mas aparentemente diferentes do da cisplatina e derivados. Sendo um metal endógeno, os seus complexos poderão originar uma menor toxicidade e atingir mais facilmente alvos específicos. Este projecto surge na sequência de resultados promissores que têm sido desenvolvidos no grupo de BioIn do CQE-FCUL com várias famílias de complexos e visa a síntese e estudo de novos complexos de Cu(I) com fosfinas e ligandos heteroaromáticos, com vista a avaliar a relação estrutura-actividade. Uma nova abordagem consiste em usar fosfinas quirais, que poderão influenciar a actividade e selectividade dos complexos, dado que o organismo é quiral.</p> <p>Objectivos do trabalho a desenvolver</p> <ul style="list-style-type: none"> Preparação de uma família de ligandos derivados da 2,2'-dipiridilamina (HDPA); Síntese de novos complexos de Cu(I) com fosfinas (incluindo quirais) e com diferentes tipos de ligandos com átomos doadores de N, O e/ou S, entre os quais, os ligandos HDPA e derivados (preparados no § anterior);





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

		<ul style="list-style-type: none"> • Caracterização dos compostos pelas técnicas espectroscópicas usuais (FT-IR, UV-vis e RMN de vários núcleos); eventuais estudos complementares por voltametria cíclica para avaliar o comportamento redox dos centros metálicos; • Estudos de estabilidade em meio fisiológico; • Estudos de interação com o DNA e proteínas séricas por técnicas espectroscópicas (ex: UV-vis. e/ou fluorescência); <p>Os novos compostos sintetizados serão sujeitos a análises biológicas com vista à avaliação das suas potencialidades anti-cancerígenas em várias linhas de células tumorais humanas (Ex: mama, leucemia, próstata)</p>
ORIENTADOR(ES):	Maria J. Brito, mjbrito@ciencias.ulisboa.pt	
LOCAL:		
25*	TÍTULO:	Validação e implementação de um método de determinação de policlorobifenilos (PCBs) em sedimentos marinhos
	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. O projeto a desenvolver neste trabalho envolve a validação e implementação do método de determinação de policlorobifenilos (PCB) em sedimentos, por Cromatografia Gasosa acoplada a Detetor de Captura Eletrónica (GC-ECD). Prevê-se que compreenda as seguintes etapas:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Pesquisa bibliográfica sobre os diversos temas que compõem a parte experimental, nomeadamente validação de métodos, a importância da determinação de PCBs em sedimentos marinhos, a técnica cromatográfica a ser utilizada. 2. Otimização das condições de aquisição e de processamento de dados cromatográficos. 3. Após a otimização das condições de análise instrumental, proceder-se-á à validação do método, recorrendo à preparação e análise de padrões. 4. Preparação de amostra de acordo com um método já implementado no laboratório [1]. 5. Aplicação dos dados na determinação da gama de trabalho, limiares analíticos, incerteza do método e critérios de avaliação dos parâmetros de controlo de qualidade [2;3]. 6. Verificação dos requisitos necessários à submissão do ensaio à acreditação pela NP EN ISO/IEC 17025:2018 [4]. 7. Escrita da dissertação para apresentação em provas publicas e do relatório a apresentar ao IH. <p>1. OSPAR COMMISSION - JAMP Guidelines for Monitoring Contaminants in Sediments, Agreement Ref. No: 2002-16, (2015), 111 p; 2. Eurachem Guide – The Fitness for Purpose of Analytical Methods – A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, Second Edition, (2014), 70 p; 3. Eurachem / CITAC Guide CG 4 – Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement, Second Edition, (2012), 141 p. 4. Norma NP EN ISO/IEC 17025:2018 – Requisitos gerais de competência de laboratórios de ensaio e calibração, Instituto Português da Qualidade, Lisboa, 37 p.</p>
	TÍTULO:	Avaliação detalhada da incerteza da medição de óleos
	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 óleos e gorduras e hidrocarbonetos, por espectrometria de Infravermelho FTIR em águas [1,2]. Esta avaliação deverá recorrer à combinação de componentes de incerteza pelo Método Monte Carlo e à utilização de modelos de regressão 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 [3].</p> <p>1. Carla Palma, Vanessa Morgado, Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Top-down evaluation of matrix effects uncertainty, Talanta 192 (2018) 278-287; 2. 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; 3. Ricardo J. N. Bettencourt da Silva, Alex Williams (Eds.), Eurachem/CITAC Guide: Setting and Using Target Uncertainty in Chemical Measurement, Eurachem, 2015</p>
ORIENTADOR(ES):	Carla Palma, Carla.Palma@hidrografico.pt	
LOCAL:		Instituto Hidrográfico
26	TÍTULO:	Validação de ensaios físico-químicos de biocombustíveis sólidos para a acreditação internacional de capacidades analíticas





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

RESUMO:	<p>A Labellec é uma empresa do grupo EDP que realiza um conjunto alargado de estudos e ensaios em diferentes áreas que variam desde o controlo da qualidade de equipamentos à monitorização ambiental de bacias hidrográficas (labellec.edp.com). A biomassa constitui um recurso renovável e endógeno e a sua utilização para produção de energia pode ajudar a aumentar a resiliência e sustentabilidade do território nacional. O processo de produção de energia é função de diversos fatores, com a capacidade calorífica da biomassa e a composição das cinzas produzidas a constituírem fatores de elevada relevância na eficiência e gestão de resíduos das unidades de produção. Este tema de mestrado tem como objetivo desenvolver e validar métodos de caracterização de biomassa e de cinzas da sua combustão para suporte à produção energética com base neste recurso renovável. A validação dos métodos deve incluir a avaliação da incerteza da medição recorrendo a abordagens capazes de assegurar níveis de incerteza adequados ao objetivo dos ensaios [1]. As metodologias analíticas a desenvolver serão submetidas a acreditação internacional seguido a Norma ISO/17025:2017 [2] que comprova a competência técnica e organizacional da instituição que realiza o ensaio. O aluno(a) que realize este plano de mestrado irá adquirir competências técnicas com elevada empregabilidade na área de validação de métodos, controlo da qualidade de análises, avaliação da incerteza da medição e acreditação de ensaios.</p> <p>1. R. Cordeiro, C. Rosa, R. Bettencourt da Silva, <i>Accred. Qual. Assur.</i> 23 (2018) 57-71 (DOI 10.1007/s00769-017-1296-2); 2. NP EN ISO/IEC 17025:2018 – Requisitos gerais de competência para laboratórios</p>	
ORIENTADOR(ES):	Cristina Marin, Cristina.Marin@edp.com ; Gabriel Silva	
LOCAL:		EDP - LABELLEC
27	TÍTULO:	Development of drugs to treat tuberculosis targeting dprE1
RESUMO:	<p>Our main line of investigation is related to the development of new compounds to treat tuberculosis and we have been developing with success ester prodrugs of weak acids that addressed efficiently pyrazinamide resistance and demonstrated activities higher than the reference pyrazinamide molecule¹. We also proved that mycobacteria can activate the esters to the corresponding acids²</p> <p>When we studied the activity of acid derivatives containing the nitro group, we observed with surprise an unusual higher activity than could be expected from the pka of the acid⁴. All our active compounds contain the nitro function, and related molecules containing a dinitrobenzamide (DNB) or nitrobenzoate groups like DNB1 are described as inhibitors of the enzyme decaprenylphosphoryl-beta-D-ribose oxidase (dprE1)⁵ and are an emergent new group of important candidates to antitubercular drugs. We believe that our compounds may act in the same target we are currently exploring the mechanism of action and expanding our library of active compounds. We are offering a proposal of a master thesis based on the development of antitubercular drugs targeting dprE1 and obtain insights from the mechanism of action of our nitro compounds. The library of compounds will be based in our in-house compounds and will be expanded with structures derived from our lead compounds and from highly active DNBS, such as DNB1. The library will allow several biological assays to be performed, aimed at comparing the bioactivity of previously developed and new compounds to a known dprE1 inhibitor and providing essential clues about the mode of action of such compounds. The work will be focuses in chemistry (synthesis and stability of the compounds) but part of the assessment work can be done by the student if he wants to learn techniques related with determination of activity. The assessment will be based in the determination of the minimal inhibitory concentration (MIC) and minimal bactericidal concentration (MBC) values and growth curves for all compounds against <i>M. tuberculosis</i> (control strain), using well-known methodologies. The antimycobacterial activity of a selected group of compounds will be further studied in multiple mycobacterial strains, namely, <i>M. bovis</i> BCG, <i>M. smegmatis</i> and <i>M. avium</i>, as well as other bacterial strains resistant to dprE1 inhibitors.</p> <p>1. Pires, D. <i>et al.</i> Esters of pyrazinoic acid are active against pyrazinamide-resistant strains of Mycobacterium tuberculosis and other naturally resistant mycobacteria in vitro and ex vivo within macrophages. <i>Antimicrob. Agents Chemother.</i> 59, 7693–7699 (2015); 2. Valente Emilia, Testa Bernard, Constantino, L. Activation of benzoate model prodrugs by mycobacteria. Comparison with mammalian plasma and liver hydrolysis. <i>Eur. J. Pharm. Sci.</i> (2021); 4. Freire, R. M. S. Estudo de ésteres de derivados do ácido benzóico com álcoois de cadeia longa como pró-fármacos destinados ao tratamento da tuberculose. (2020); 5. Christophe, T. <i>et al.</i> High content screening identifies decaprenyl-phosphoribose 2' epimerase as a target for intracellular antimycobacterial inhibitors. <i>PLoS Pathog.</i> 5, (2009).</p>	
ORIENTADOR(ES):	Luís Constantino; constant@ff.ul.pt	
LOCAL:		Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa
28	TÍTULO:	Formulation of a nutraceutical enriched in neuroprotective nutrients
RESUMO:	<p>The chub mackerel (<i>Scomber colias</i>) is a pelagic fish with a high nutritional value due to its composition with high protein contents and vitamins from complex B. Furthermore, it is rich in omega 3 polyunsaturated fatty acids (n-3 PUFA), mainly docosahexaenoic acid (DHA, 22:6ω3) which represent an important portion of the lipid fraction present in human brain. For instance, it is now known that DHA is involved with the improvement of learning capacity and memory. In fact, reduced levels of DHA have been linked to cognitive decline during ageing, leading to relate this fatty acid with an important role in neurodegenerative diseases prevention, including Alzheimer's disease. Since this fatty</p>	






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

	<p>acid is not produced in organism in the required amounts, an adequate intake is necessary, in order to keep DHA levels in neuronal cells. This is particularly relevant for middle-age and elderly population where the ageing of the gastrointestinal tract leads to a less absorption of some of these nutrients. In this concern, a suitable nutritional approach, as is the case of nutraceutical foods, may be a valuable tool to provide the required amounts of DHA. This proposal has two main advantages: 1) take advantage of a positive synergistic interaction between the neuroprotective nutrients naturally present in the chub mackerel (DHA, Selenium and vitamin B₁₂) with other foods and nutrients; 2) opportunity to fortify the nutraceutical formulation with the desired nutrients and in the best proportions.</p> <p>OBJECTIVES</p> <p>- Formulate a nutraceutical food, having chub mackerel as main ingredients. Chub mackerel extracts will also be included in the nutraceutical formulation. Hamburgers and croquettes may be suitable options for this nutraceutical food; Characterization of the novel food, including the proximate composition and its lipidic profile; Evaluate the nutraceutical food stability during storage and estimate its shelf-life.</p> <p>PROJECT DESCRIPTION</p> <p>1. The first part of this project deals with the concept and formulation of the nutraceutical food. These will include the evaluation of different proportions of selected ingredients: chub mackerel, food extracts (chub mackerel), and seasoning (salt). The nutraceutical development will be guided in sensory analysis in order to determine the acceptance of the target population; 2. In second place, the novel food will be characterized in terms of the proximate composition and its lipid fraction. The lipid profile will be determined by chromatographic methods such as high-performance thin layer chromatography and gas-chromatography; 3. In the third task, the nutraceutical food stability during storage and its shelf-life will be estimated. These objectives will be attained through the evaluation of lipid hydrolysis and oxidation, that will be measured, respectively, through free fatty acid accumulation (by means of high-performance thin layer chromatography) and in the peroxide value (determined spectrophotometrically).</p>
ORIENTADOR(ES):	Narcisa Bandarra, narcisa@ipma.pt
LOCAL:	 Instituto Português do Mar e da Atmosfera
29	TÍTULO: Cheminformatics to speed-up thermal hazards screening of active pharmaceutical ingredients
RESUMO:	<p>The advances in computational power technology enabled a series of opportunities for CDMO's (Contract Development and Manufacturing Company) to speed up process from development to commercial scale. Therefore, the number of new chemical entities available in the market has increased exponentially while information about their safe handling has not. This often leaves chemists with the challenge of route-scouting with limited information about the intrinsic hazardous nature of the chosen chemical scaffold, which can pose a serious threat at a larger scale, resulting in costly and time-consuming late-stage development activities with impact on the project timelines. The work proposed aims to take advantage of years of Process Safety work done at Hovione, by generating a predictive model as a hazard screening tool. One will use the experimental data from Differential Scanning Calorimetry in search for correlations between the materials chemical structure (for example, via Benson groups, molecular descriptors, oxygen balance, among other indexes) and the materials decomposition temperature onset and overall energy. In parallel, one will also aim to investigate the influence of common process solvents in the material's thermal stability, thus enriching the model predictive capabilities beyond the current state-of-the-art. Such platform will allow us to get a quick answer while minimizing the probability from a hazardous situation to take place. It can be used to assess the risk during route scouting, process development, new business assessment and technology transfers, thus leading to safer, faster, and more cost-effective manufacturing. The main objectives of the project include:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Gather relevant literature on the subject to build a comprehensive review manuscript and in-house training. • Collect Hovione internal raw data of materials thermal stability analysis (from Process Safety reports) to build a database and convert the chemical entities structures into numeric properties such as (not limited to) molecular descriptors, enthalpies, oxygen balance, among others. • Investigate putative relationships between the molecules structure & chemical properties and their associated thermal hazards using non-linear regression models or other well-established techniques. • (Optional) Investigate the influence of common process solvents (alcohols, esters, ketones, among others...) in the materials thermal stability using the available Process Safety lab equipment's & team expertise and incorporate the findings into the previous relationships. • Define the methodology limits of application and build a predictive model to improve Hovione's current risk assessments tools, to be used as an alternative to experimental testing whenever possible. This internship will have a duration of 6 months and will take place at Hovione facilities.
ORIENTADOR(ES):	Elsa Gonçalves, edgoncalves@hovione.com
LOCAL:	 HOVIONE
30	TÍTULO: Caraterização FQ de formulações híbridas
RESUMO:	<p>Existe cada vez mais uma grande preocupação com o meio ambiente. Neste sentido as entidades reguladoras a nível europeu têm vindo a ser cada vez mais exigentes no sentido de reduzir o teor de fitofarmacêuticos utilizados, garantir uma maior preservação do solo e o teor e qualidade dos resíduos que deixamos durante e após a proteção das</p>





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

		<p>culturas. Neste âmbito, a Ascenza tem vindo a desenvolver, ferramentas que permitam cumprir as metas propostas. A diminuição do uso de fitofarmacêuticos é um dos principais objetivos da <i>Estratégia do Prado para o Prado</i>, e neste sentido a Ascenza tem vindo a desenvolver formulações híbridas. A introdução de produtos naturais, óleos e adjuvantes são algumas das soluções que vão permitir manter ou melhorar a eficácia dos produtos com um teor de substância ativa de síntese mais reduzido. Estes desenvolvimentos necessitam ser devidamente caracterizados ao nível das propriedades físico-químicas. Com este intuito e, no domínio da Química Analítica, o estudante irá adquirir competências em técnicas de preparação de amostras, cromatográficas e hífenadas, com particular incidência cromatografia em fase gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC-MS) e cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massa (LC-MS) na análise de substância ativa em diversos tipos de matrizes, assim como propriedades físicas associadas a este tipo de formulação.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Carolina Pessoa, carolina.pessoa@ascenza.rovensa.com ; Teresa Pinto
	LOCAL:	 ASCENZA Agro
31	TÍTULO:	Desenvolvimento de uma metodologia analítica para a análise de substâncias dopantes em contexto desportivo
	RESUMO:	<p>A utilização de substâncias dopantes representa uma ameaça contra os objetivos éticos e morais do desporto para além de pôr em causa a saúde dos praticantes desportivos. A essência do desporto é que os competidores sigam as regras de fair-play. Quando os níveis de treino se tornam muito elevados e o nível de exigência desportiva aumenta poderá haver a tentação, por parte do praticante desportivo, ou de quem o rodeia, de recorrer a meios farmacológicos e químicos de forma a ganhar vantagem competitiva. O presente projeto, visa o desenvolvimento de uma metodologia analítica para a determinação de substâncias com efeito dopante em amostras de Urina, com recurso a técnicas de microextração analítica inovadoras, com análise posterior com base na cromatografia líquida e/ou gasosa (LC e GC) acopladas à espectrometria de massa (MS). Estes compostos estão inseridos na lista de substâncias e métodos proibidos em contexto desportivo, sendo a monitorização do seu cumprimento e atualização, responsabilidade da Agência Mundial Antidopagem (WADA - World Anti-Doping Agency). Neste sentido, o principal objetivo será o desenvolvimento de uma metodologia analítica, com base em técnicas de preparação de amostras inovadoras e amigas do ambiente, tais como a microextração adsorptiva em barra (BAμE), para a extração a níveis vestigiais dos analitos previamente selecionados. Esta metodologia engloba uma fase de otimização de diversos parâmetros analíticos, que podem afetar a eficiência da extração, tais como a fase sorvente a usar, o tempo de extração e pH da matriz, por forma a atingir elevada sensibilidade e seletividade. Posteriormente a identificação dessas substâncias será feita por GC-MS e/ou LC-MS, pretendendo-se determinar alguns parâmetros relevantes do método desenvolvido, como sejam: Capacidade de identificação, Robustez; % de recuperação, entre outros.</p>
	ORIENTADOR(ES):	Carlos Almeida, carlos.almeida@ipdj.pt
	LOCAL:	 Laboratório de Análises de Dopagem
32*	TÍTULO:	Produção in situ de enzimas hemicelulolíticas para a intensificação da produção de etanol celulósico^a
	TÍTULO:	Co-fermentação de açúcares C5/C6 para a intensificação da fermentação para bioetanol a partir de materiais celulósicos^b
	TÍTULO:	Caracterização de elementos maiores e identificação de menores em frações orgânicas de biomassa residual por espectroscopia de fluorescência de raios X em dispersão de comprimentos de onda^c
	TÍTULO:	Estudo de processos de deslenhificação, recuperação, purificação e caracterização de lenhinas obtidas por diferentes processos^d
	TÍTULO:	Processamento de materiais baseados na tetraedrite para um desenvolvimento sustentável^e
	TÍTULO:	Recuperação de metais de baterias de iões-lítio em fim-de-vida por processamento hidrometalúrgico^f
	RESUMOS:	A disponibilizar pela Coordenação em caso de interesse; ^{a,b,d,e,f} Projetos com bolsa
	ORIENTADOR(ES):	^a Susana Marques e Francisco Gírio; ^b Susana Alves e Francisco Gírio; ^c Ana Crujeira; ^d Florbela Carvalheiro e Francisco Gírio; ^e Filipe Neves; ^f Carlos Nogueira (LNEG) e Paula Paiva (FCUL)
	LOCAL:	 Laboratório Nacional de Engenharia e Geologia
33*	TÍTULO:	Design of membrane models mimicking the inner nuclear membrane in healthy and premature aging^a
	TÍTULO:	Targeting SARS-CoV-2, Zika, and other viruses in the brain to prevent neurological damages^b
	TÍTULO:	Fighting bacteria using innovative eradication techniques^c



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

RESUMO:	A disponibilizar pela Coordenação em caso de interesse	
ORIENTADOR(ES):	ªMaria Sarmento e Nuno Santos; º,b,c Miguel Castanho e Ana Sarmento	
LOCAL:	 Instituto de Medicina Molecular	Instituto de Medicina Molecular
34*	TÍTULO:	Diversos projetos no domínio da bioquímica
RESUMO:	A disponibilizar pela Coordenação em caso de interesse	
ORIENTADOR(ES):	-	
LOCAL:	 INSTITUTO GULBENKIAN DE CIÊNCIA	Instituto Gulbenkian de Ciência

*Um tema por instituição ou empresa